

**Bestimmung der Zwischengitterpositionen
von Deuterium in Niob nach der
Channeling-Methode**

Heinz-Dieter Carstanjen

1973



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41553803_0075

Bestimmung der Zwischengitterpositionen von
Deuterium in Niob nach der Channeling-Methode

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades der Fakultät für Physik
der Ludwig-Maximilians-Universität München

Vorgelegt von
Diplom-Physiker
Heinz-Dieter Carstanjen

München

1973

1. Berichterstatter: R. Sizmann

2. Berichterstatter: H. Jagodzinski

Tag der mündlichen Prüfung: 26. Juli 1973



Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung
1.1	Bestimmung der kristallographischen Positionen von Wasserstoff und Deuterium in Metallen
1.2	Channeling-Methode
1.2.1	Methodisches
1.2.2	Modellbetrachtungen
1.2.3	Experimentelle Beispiele
1.3	Problemstellung
2	System Niob-Wasserstoff und Niob-Deuterium
3	Experiment
3.1	Beladen der Proben mit Deuterium
3.2	Einbau und Orientierung der Kristalle
3.3	Versuchsführung
4	Berechnung der Protonenausbeute
4.1	Protonenausbeute
4.2	Wirkungsquerschnitt der $D(d,p)T$ Reaktion
4.3	Deuteriumverteilung in Niob
4.4	Orts- und Energieverteilung der Deuteronen im Kristall
4.4.1	Streuung an den Kristallatomen
4.4.2	Thermische Schwingungen der Gitteratome
4.4.3	Energieverlust der Deuteronen in Niob
4.4.4	Streuung an Elektronen
4.4.5	Streuung an gelöstem Deuterium
4.5	Modell-Rechnung
4.5.1	Wahl der Streuzelle
4.5.2	Eingabedaten
4.5.3	Streueinheit
4.5.4	Ausgabedaten
4.5.5	Kontrolle des Rechenprogramms

5	Ergebnisse der Modellrechnungen
5.1	Fluss- und Energieverteilung
5.1.1	Axialer Einschuss
5.1.2	Schiefer Einschuss
5.2	Flussverteilung an den diskutierten Zwischen- gitterpositionen von Deuterium in Niob
5.2.1	$\langle 001 \rangle$ -Richtung
5.2.2	$\langle 111 \rangle$ -Richtung
5.3	Berechnung der Gesamtausbeute an Protonen
6	Vergleich der berechneten Profile mit den Mess- kurven
6.1	Korrekturen
6.1.1	Experimentelle Profile
6.1.2	Theoretische Profile
6.2	Vergleich der theoretischen Profile mit den experimentellen Profilen
6.2.1	$\langle 001 \rangle$ -Richtung
6.2.2	$\langle 111 \rangle$ -Richtung
7	Diskussion
7.1	Deuterium und Wasserstoff in Niob
7.2	Zur Channeling-Methode
8	Zusammenfassung
	Literaturverzeichnis
	Anhang: Komputerprogramm

1 Einleitung

Wasserstoff und Deuterium werden in einer Reihe von Metallen interstitiell gelöst. Über ihre kristallographischen Positionen, die Orte maximaler Aufenthaltswahrscheinlichkeit, besteht noch weitgehend Unklarheit. Die Bestimmung dieser Positionen mit den bisher üblichen Methoden, auf die in Abschnitt 1.1 der Einleitung kurz eingegangen wird, scheitert bei kleinen Konzentrationen meist an der zu geringen Empfindlichkeit der verwendeten Verfahren.

In der vorliegenden Arbeit wird eine neuere Methode - die Channeling-Methode - erfolgreich auf das System Niob-Deuterium angewendet. Diese wird in Abschnitt 1.2.1 der Einleitung vorgestellt und in 1.2.2 an Modellbeispielen erläutert. Einige experimentelle Beispiele für die Anwendung auf andere Systeme werden in Abschnitt 1.2.3 aufgeführt. In 1.3 wird schliesslich auf die Problemstellung dieser Arbeit eingegangen.

1.1 Bestimmung der kristallographischen Positionen von Wasserstoff und Deuterium in Metallen

Erste Hinweise auf mögliche Konfigurationen erhält man aus der Kristallsymmetrie und aus der Atomanordnung im Kristall, sowie aus der Berechnung der Verzerrungsenergie für verschiedene Positionstypen (vgl. z.B. /1/). Vielfach ist man, vor allem bei geringer Löslichkeit von Wasserstoff, auch heute noch auf solche Überlegungen angewiesen (z.B. H in Fe).

Die experimentelle Bestimmung der Zwischengitterpositionen stösst auf erhebliche Schwierigkeiten, insbesondere bei niedrigen Konzentrationen: Die übliche Methode der Fourieranalyse von Röntgenreflexen scheitert daran, dass zu wenig Elektronen an den Positionen der H- und D-Kerne lokalisiert sind. Die Verwendung von Neutronen an Stelle von Röntgenstrahlen scheitert bei geringen Konzentrationen und hohen Temperaturen an der Diffusionsbewegung dieser leichten Atome. In jüngster Zeit wurde die inkohärente, inelastische Streuung kalter Neutronen

benutzt, um Aufschluss über die Zwischengitterpositionen zu erhalten. Die Halbwertsbreiten der Energieverteilung der Neutronen werden mit theoretischen Halbwertsbreiten verglichen, die für verschiedene Positionstypen berechnet wurden /2/. Diese Methode ist mit einem erheblichen experimentellen Aufwand verbunden und erfordert ein theoretisches Modell, in dem Zwischengitterposition und Diffusionsweg bereits enthalten sind.

1.2 Channeling-Methode

Die Gitterführung (Channeling) schneller Deuteronen in Einkristallen liefert eine neue Methode zur Bestimmung der Zwischengitterplätze von Deuterium (und damit von Wasserstoff, weil vorausgesetzt werden darf, dass beide Isotope kristallographisch gleiche Plätze besetzen). Sie gestattet es vielfach, durch eine qualitative Abschätzung eine ja-nein Entscheidung zwischen mehreren zur Diskussion stehenden Positionen zu treffen.

1.2.1 Methodisches

Die Methode beruht auf der für Channeling typischen Flussverteilung schneller Ionen in Kristallen. Trifft ein Ionenstrahl auf einen Einkristall parallel zu einer niedrig indizierten Gitterrichtung (axiales Channeling), so sorgt die führende Wirkung der Atomreihen dieser Richtung für einen erhöhten Ionenfluss zwischen den Atomreihen (Fluxpeaking) und einen (im Vergleich zu einer Flussgleichverteilung) reduzierten Fluss entlang der Atomreihen (vgl. die Flusskonturen der Abb. 15). Wird der Kristall gegenüber der Strahlrichtung gedreht, so ändert sich die Flussverteilung. Fällt die Drehebene mit einer niedrig indizierten Kristallebene zusammen, so geht die Flussverteilung in die des "planaren" Channeling über mit einem erhöhten Ionenfluss zwischen und einem reduzierten Fluss in den Atomebenen, wobei das Flussmaximum unter dem Wert liegt, der bei axialem Channeling erreicht wird. Fällt die Drehebene nicht

mit einer niedrig indizierten Kristallebene zusammen (random-Fall), so geht die Flussverteilung in eine Gleichverteilung über. Misst man die Ausbeute einer Wechselwirkung (z.B. Röntgenanregung, Kernreaktion oder Rückstreuung) zwischen den einfallenden Ionen und den Zwischengitteratomen in Abhängigkeit vom Einschusswinkel, so erhält man daraus - bei Kenntnis der Flussverteilung im Kristall - Auskunft über die Zwischengitterpositionen.

1.2.2 Modellbetrachtungen

Die Methode soll im folgenden an Beispielen erläutert werden. Abb. 1 zeigt die Projektion zweier Kristallgitter (Kreise)

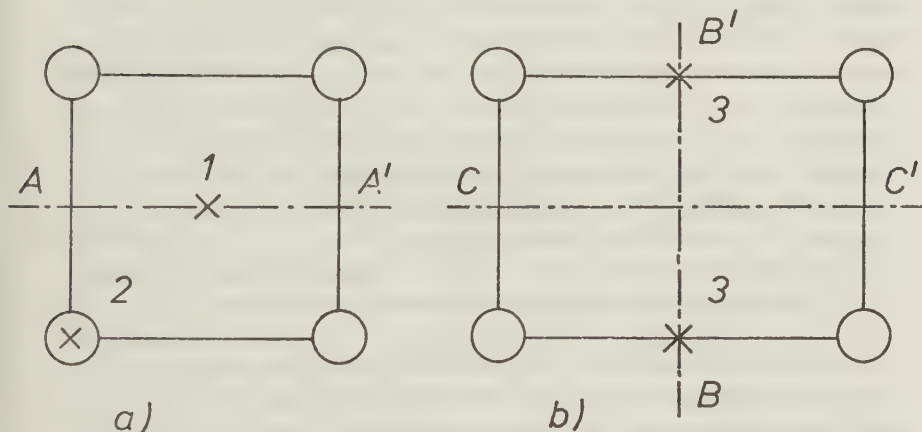


Abb. 1

mit verschiedenen Zwischengitterpositionen (Kreuze). Die Einfallrichtung des Ionenstrahles sei senkrecht zur Bildfläche. Mit einer random-Drehebene und Zwischengitteratomen in Position 1 (dem Ort maximalen Ionenflusses bei axialem Channeling) erhält man ein Ausbeuteprofil mit einem Maximum bei $\psi = 0^\circ$ (= Strahl senkrecht zur Bildfläche). Mit Zwischengitteratomen in Pos. 2 erhält man ein Ausbeuteminimum bei $\psi = 0^\circ$, da der Ionenfluss bei achsenparallelem Einschuss am Ort der Atomreihen stark reduziert ist.

Die Form der Ausbeuteprofile hängt weitgehend von der Wahl der Drehebene ab.

Maxima verschiedener Höhe. So erhält man für das oben behandelte Beispiel (random-Drehebene und Zwischengitteratom in Pos. 1) ein Ausbeutemaximum über einem relativ niedrigen Untergrund, da der Ionenfluss in Pos. 1 bis auf den Gleichverteilungswert absinkt. Bei Drehung in der Ebene AA' (Abb. 1a) erhält man für dieselbe Position ein Maximum über einem relativ hohen Untergrund, entsprechend dem Übergang von axialem Channeling (mit dem Flussmaximum in Pos. 1) zu planarem Channeling (mit einem erhöhten Fluss entlang der Linie AA').

Maximum oder Minimum. Ein extremer Fall ist in Abb. 1b dargestellt. Die Zwischengitterpositionen 3 liegen auf den Sattelpunkten zwischen den Atomreihenpotentialen. Bei Drehung entlang der Linie CC' erhält man bei $\psi = 0^\circ$ ein relatives Ausbeutemaximum (entsprechend der Abnahme des Ionenflusses in Pos. 3 beim Übergang von axialem zu planarem Channeling entlang der Linie CC'). Anders bei Drehung entlang der Linie BB'. Hier erhält man ein relatives Ausbeuteminimum bei $\psi = 0^\circ$ (entsprechend der Zunahme des Ionenflusses in Pos. 3 beim Übergang von axialem zu planarem Channeling entlang der Linie BB').

Diese Abhängigkeit von der Wahl der Drehebene kann jedoch benutzt werden, um damit die Lage der Zwischengitteratome in der Projektionsebene festzulegen. Auskunft über die räumliche Lage in der Elementarzelle erhält man, indem man Ausbeuteprofile in einer anderen niedrigindizierten (kristallographisch nicht identischen) Richtung aufnimmt. Die Kombination beider Verfahren ist vor allem dann von Bedeutung, wenn mehrere, zwar kristallographisch identische, aber nicht in der Projektion identische Positionen gleichzeitig besetzt sind.

1.2.3 Experimentelle Beispiele

Die Methode wurde in den letzten Jahren verschiedentlich zur Bestimmung der Positionen von Fremdatomen in Kristallen benutzt (vgl. /3-6/, /17/, /49/).

So u.a. von North und Gibson /49/, die zur Bestimmung der Positionen von implantiertem Bor in Silizium eine $B^{11}_{(p,\alpha)}Be^8$ Reaktion verwendeten, von Cairns, Nelson und Briggs /4/, die für dasselbe System die Anregung von Bor-K-Strahlung durch eingeschossene Protonen benutzten oder auch von Andersen, Andreasen, Davies und Uggerhøj /17/, die zur Bestimmung der Positionen von implantiertem Ytterbium in Silizium die Rückstreurate eingeschossener α -Teilchen registrierten. Man vergleiche dazu auch den zusammenfassenden Artikel von Eisen /3/.

In allen diesen Arbeiten wird die Ortsbestimmung der Fremdatome mit qualitativen Argumenten durchgeführt. Das trifft auch für eine Arbeit von Iferov, Pokhil und Tulinov zu /7/, in der das hier interessierende System Niob-Deuterium untersucht wurde. Die Autoren bestimmen darin die Protonenausbeute einer $D(d,p)T$ -Kernreaktion zwischen dem gelösten Deuterium und 400 keV Deuteronen. Bei Variation des Einschusswinkels ψ zwischen Deuteronenstrahl und der $\langle 111 \rangle$ -Kristallachse finden sie bei $\psi = 0^\circ$ ein Maximum in der Protonenausbeute (vgl. Abb. 2) und schliessen daraus auf Tetraederplätze für Deuterium in Niob.

Ein erster Vergleich von Reaktionsausbeutemessungen mit theoretischen Rechnungen stammt von Fischer, Sizmann und Bell /8/. Untersucht wurde das System Kupfer-Deuterium, wobei die Neutronenausbeute einer $D(d,n)He^3$ -Reaktion (zwischen 75 keV Deuteronen und in Kupfer implantiertem Deuterium) registriert wurde. Die Berechnung der Neutronenausbeute basiert auf einem einfachen analytischen Modell. Dabei konnten verschiedene Einflüsse auf die Flussverteilung der Deuteronen, wie thermische Schwingungen der Gitteratome, Streuung der Deuteronen an den Kristallelektronen oder die spezielle Kristallsymmetrie nicht berücksichtigt werden. So liessen sich die experimentellen Ergebnisse nur qualitativ mit den Rechnungen vergleichen.

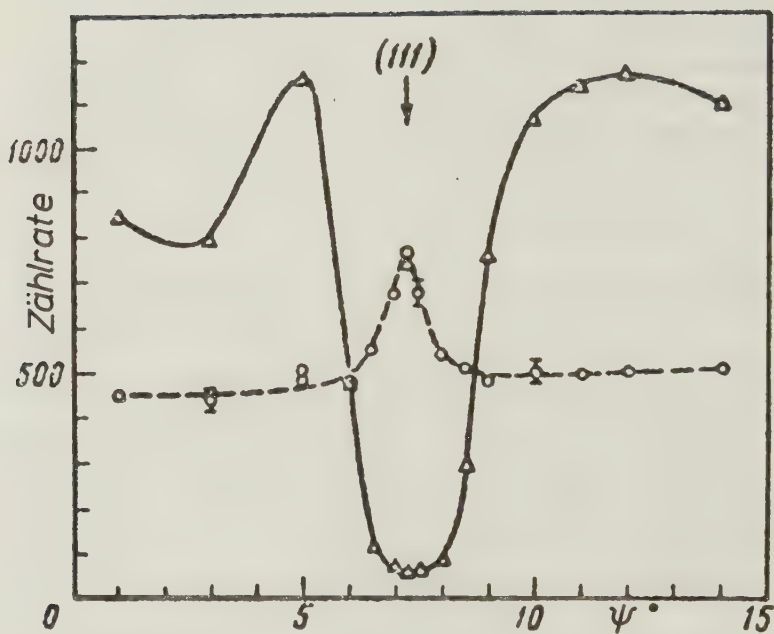


Abb. 2

Abhängigkeit der Protonenausbeute der $D(d,p)T$ Reaktion
 ($-\circ-$) und der Deuteronenrückstreurrate ($-\Delta-$) vom Winkel
 zwischen einem Deuteronenstrahl (400 keV) und der Position
 eines Niobkristalls, nach /7/

1.3 Problemstellung

In der vorliegenden Arbeit wird die Protonenausbeute der $D(d,p)T$ Reaktion benutzt, um die Zwischengitterpositionen von Deuterium in NbD_x ($x \sim 0.03$) zu bestimmen. Die Protonenausbeute dieser Reaktion wird in Abhängigkeit vom Einfallswinkel ψ eines 300 keV Deuteronenstrahles zur $\langle 001 \rangle$ bzw. $\langle 111 \rangle$ Richtung gemessen. Die Ausbeuteprofile werden anschliessend mit berechneten Profilen verglichen, wobei sich zeigt, dass in $\langle 001 \rangle$ erst durch diesen Vergleich eine Aussage über die Zwischengitterposition ermöglicht wird. Zugleich soll das hier untersuchte spezielle Problem als Musterbeispiel einer konsequenten Anwendung von schnellen Ionen zur Bestimmung der Gitterpositionen von Fremdatomen kleiner Konzentration in einem kristallinen Wirtsgitter dienen.

Die Rechnungen basieren auf einem in vielen Einzelheiten vollständigeren Modell als das oben erwähnte Modell von Fischer. Daher ist es möglich, aus einem quantitativen Vergleich zwischen Experiment und Modellrechnung eine Entscheidung über die Zwischengitterpositionen von Deuterium in Niob zu treffen. Ihre Durchführung war jedoch nur mit numerischen Verfahren und Rechenmaschinen möglich.

2 Das System Niob-Wasserstoff und Niob-Deuterium

Niob gehört zur Gruppe V der Übergangsmetalle und ist kubisch raumzentriert. Die Gitterkonstante beträgt bei 20°C 3.294 Å (vgl. /9/). Belädt man Niob aus einer Gasatmosphäre durch Diffusion mit Wasserstoff, so lassen sich dabei Lösungskonzentrationen bis zu 93 Atom % erreichen /10/. Mit anderen Methoden, die im wesentlichen atomaren Wasserstoff verwenden, kann die Konzentration sogar auf über 100 Atom % gesteigert werden /11,12/. Die Lösungsreaktion ist exotherm und deshalb nimmt die Menge an gelöstem H bei konstantem Druck mit sinkender Temperatur zu. Die Löslichkeit von H₂ in Niob im Gleichgewicht mit der umgebenden Gasphase in Abhängigkeit von Gasdruck und Temperatur zeigt Abb. 3 (Komjathy /16/, siehe auch /13,14/). Messungen der Löslichkeit von Deuterium in Niob liegen nur in geringem Umfang vor; sie soll aber nur wenig von der von Wasserstoff abweichen /9,13/. Das System Niob-Wasserstoff kann je nach Wasserstoffkonzentration C und Temperatur T in verschiedenen Phasen vorliegen. Abb. 4 zeigt das Phasendiagramm von NbH_x (nach /18/). Im Bereich $c \lesssim 5$ Atom % und $T \gtrsim 293$ K existiert nur die reine α -Phase, die bei Abkühlung in ein Gemisch von α - und β -Phasen übergeht. In der α -Phase ist NbH_x kubisch raumzentriert. Die Gitterkonstante a nimmt je Atom % H um 0.0023 Å zu /14/. Die β -Phase ist ebenfalls kubisch raumzentriert mit $a \sim 3.42$ Å (bei niedrigen H-Konzentrationen) /16/. Nach Ergebnissen anderer Autoren /20/ handelt es sich jedoch um eine orthorhombische Kristallstruktur mit einem Achsenverhältnis von $c/a = 0.995$ (bezogen auf die kubische Zelle) bei NbH_{0.6}. Insgesamt sind die Abweichungen von der kubisch raumzentrierten Kristallstruktur mit $a \sim 3.3$ Å aber klein, zumal bei niedrigem Wasserstoffgehalt. Bei 22°C liegt der Phasenumwandlungspunkt bei 6.2 Atom %.

Das Phasendiagramm von NbD_x ist bis jetzt nur in einigen wenigen Punkten bekannt; in diesen unterscheidet es sich von NbH_x nur wenig /21/.

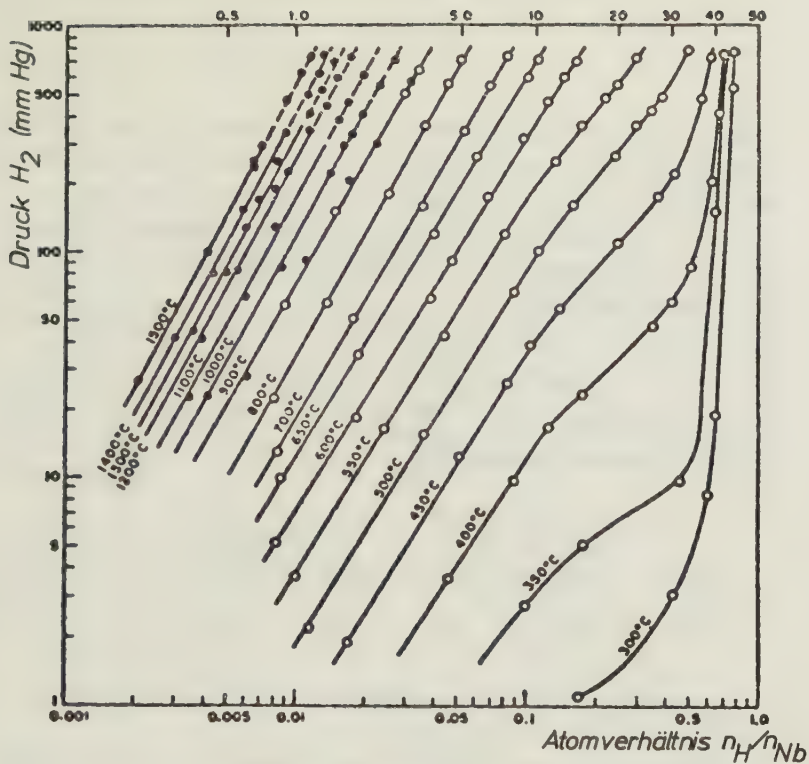


Abb. 3 Isothermen in NbH_x , nach /16/

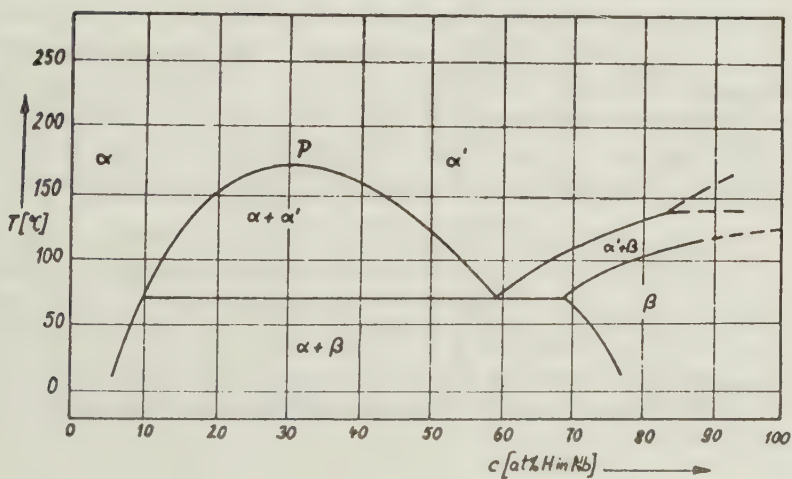


Abb. 4 Phasendiagramm von NbH_x , nach /18/

Die Lösung von Wasserstoff und Deuterium in Niob erfolgt in zwei Stufen, (1) Adsorption und (2) Transport durch Diffusion ins Kristallinnere. Über die Diffusionskoeffizienten von H und D in Niob liegen erst aus den letzten Jahren verlässliche Werte vor. Schaumann, Völkl und Alefeld /22/ fanden aus Gorskyeffektmessungen:

$$D_H = 5.4 \cdot 10^{-4} \exp(-0.110 \text{ eV/kT}) \text{ cm}^2/\text{sec} \quad \text{bzw.}$$

$$D_D = 5.6 \cdot 10^{-4} \exp(-0.135 \text{ eV/kT}) \text{ cm}^2/\text{sec}.$$

Diffusionsweglängen $l = \sqrt{Dt}$ für $T_1 = 293 \text{ K}$ und $T_2 = 373 \text{ K}$ sind in Tabelle 1 angegeben.

	$t_1 = 1 \text{ sec}$	$t_2 = 1 \text{ min}$	$t_3 = 1 \text{ h}$
$T_1 = 293 \text{ K}$	$1.62 \cdot 10^{-3} \text{ cm}$	$1.25 \cdot 10^{-2} \text{ cm}$	$9.75 \cdot 10^{-2} \text{ cm}$
$T_2 = 373 \text{ K}$	$2.88 \cdot 10^{-3} \text{ cm}$	$2.45 \cdot 10^{-2} \text{ cm}$	$1.73 \cdot 10^{-1} \text{ cm}$

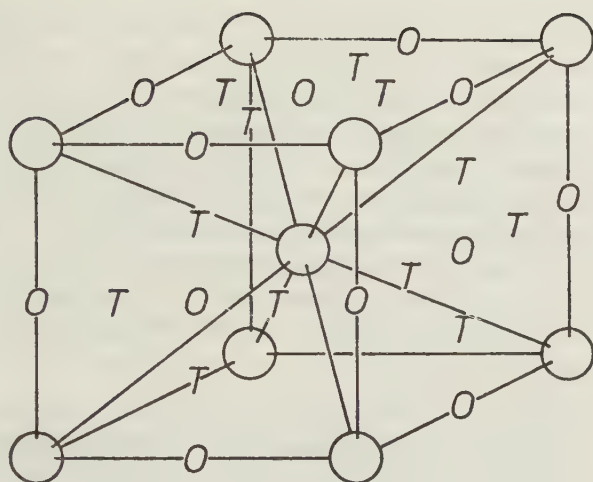
Tabelle 1 : Diffusionslängen $l = \sqrt{D \cdot t}$ von D in Nb

Danach sollte es möglich sein, eine Probe ($1 \sim 5 \text{ mm}$) schon bei 100°C innerhalb einiger Stunden mit Deuterium vollständig zu beladen. Wie jedoch Albrecht, Goode und Mallett berichten /14/, wird unterhalb $\sim 500^\circ\text{C}$ die Lösungsgeschwindigkeit durch die langsame Geschwindigkeit einer Oberflächenreaktion (Adsorptionsprozess) bestimmt. Bei 500°C und üblichen Probendimensionen (l einige mm) ist die Beladungszeit nur einige Sekunden. Genauere Messungen der Oberflächenreaktion sind zur Zeit noch nicht bekannt. Nach eigenen Beobachtungen (siehe auch /23/) bleibt der Deuteriumverlust einer beladenen Probe bei Zimmertemperatur während 1 Stunde unter 1 % des Anfangsgehaltes.

Über die Art der Zwischengitterplätze, die H oder D in Niob insbesondere bei niedrigen Konzentrationen einnehmen, bestand bis vor kurzem noch Unklarheit. So bemerkt Mueller 1968 /24/ über die Positionen von H in Niob: 'There have been no neutron diffraction studies of any of the niobium hydrogen phases, so that the positions of the hydrogen atoms in all cases are

$$T: (\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, 0)$$

$$O: \begin{cases} (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0) \\ (\frac{1}{2}, 0, 0) \end{cases}$$



$$H: (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$$

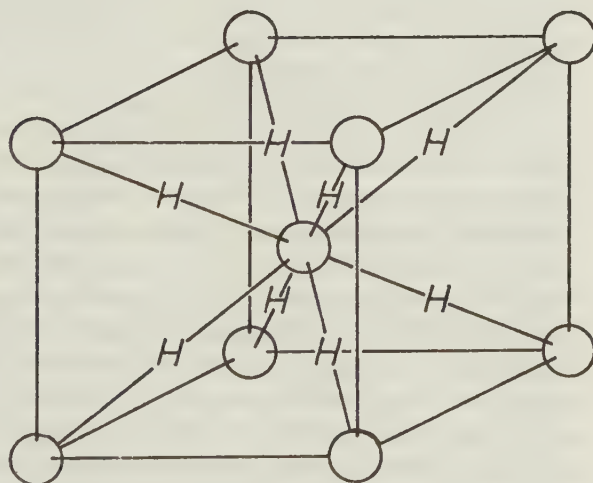


Abb. 5 T: Tetraeder-, O: Oktaeder-, H: Hexaeder-
positionen in einem kubischraumzentrierten Gitter

strictly subjects of conjecture'. Bis 1963 wurde allgemein angenommen, dass Wasserstoff und Deuterium in kubisch raumzentrierten Metallen Oktaederplätze $\{(1/2, 0, 0), (1/2, 1/2, 0)\}$ besetzen. In Abb. 5 sind diese Positionen mit "O" bezeichnet. Erst 1963 hat Beshers /1/ aus Gründen der Kristallsymmetrie, des für Fremdatome verfügbaren Raumes und der Verzerrungsenergie geschlossen, dass Tetraederplätze $(1/2, 1/4, 0)$, in Abb. 5 mit T bezeichnet, sogar wahrscheinlicher sind. Neuerdings wurden daneben auch einfach kubische Zwischengitterplätze (Hexaederplätze) $(1/4, 1/4, 1/4)$ in Betracht gezogen (/25/, /26/). Sie sind in Abb. 5 mit "H" bezeichnet.

Die Kenntnis der Zwischengitterpositionen ist für die Auswertung von Diffusionsdaten und für die Erstellung von Diffusionsmodellen von Bedeutung. So beträgt z.B. die Zahl nächstbenachbarter Zwischengitterplätze gleichen Typs bei Oktaeder- und Tetraederplätzen jeweils 4, dagegen bei Hexaederplätzen 6. Auch werden diese Positionen bei der Auswertung von Kernspinresonanzexperimenten benötigt. Es ist deshalb verständlich, dass wiederholt versucht worden ist, die Positionen von Wasserstoff oder Deuterium in Niob zu bestimmen.

1964 vergleichen Zamir und Cotts /27/ ihre Kernspinresonanzexperimente an NbH_x ($x \sim 0.7$) mit Rechnungen, in denen sie Oktaederplätze annehmen und finden gute Übereinstimmung. Erst in den letzten Jahren verdichten sich die Ergebnisse in Richtung auf Tetraederplätze. 1968 finden Somenkov u.a. /48/ bei Neutronenstreuexperimenten an NbH_x und NbD_x ($x > 0.84$, β -Phase), dass die Streuintensitäten am besten mit Tetraederplätzen übereinstimmen. 1972 finden Birchall und Ross /31/ aus der Streuung kalter Neutronen an NbH_x ($x = 0.08$, α -Phase) eine Aufspaltung der lokalen Schwingungsmoden der Wasserstoffatome, was sie mit einer Besetzung von Tetraederplätzen erklären. Ebenfalls 1972 finden Stump, Gissler und Rubin /2/ bei Neutronenstreuexperimenten an NbH_x ($x = 0.07$, α -Phase), dass die gemessenen Halbwertsbreiten der Energieverteilung der gestreuten Neutronen mit den berechneten am besten übereinstimmen, wenn sie Tetraederplätze annehmen.

3 Experiment

Es wurden zwei quaderförmige Niobeinkristalle mit den Abmessungen $6.5 \times 6.5 \times 9.5 \text{ mm}^3$ verwendet. Der Fremdatomgehalt war kleiner als 0.05 Gewichts %. Von den Einkristallen besass der eine sechs (100), der andere zwei (111) Oberflächen (Orientierungsgenauigkeit $\pm 3^\circ$). Das Mosaikspread der Kristalle wurde mit einem Doppelkristallspektrometer zu $\pm 0.11^\circ$ bestimmt.

3.1 Beladen der Proben

Zur Beladung mit Deuterium wurde der Niobkristall auf einem Träger aus V2A in ein Quarzrohr gebracht, das anschliessend bis 10^{-7} Torr evakuiert, dann mit 50 Torr Deuterium gefüllt und in einen Temperofen geschoben wurde. Die Temperatur des Niobkristalls konnte mit einem Thermoelement kontrolliert werden. Bei 600°C wurde ca. 4 Stunden beladen und anschliessend bei konstantem Deuteriumdruck mit ca. $20^\circ/\text{s}$ bis 100°C und mit ca. $10^\circ/\text{min}$ von 100°C bis Raumtemperatur abgekühlt. Der Deuteriumgehalt der Proben (um 3 Atom %) wurde durch Wiegen der Kristalle vor und nach dem Beladen bestimmt (Masse der Proben ca. 3 g, Masse des absorbierten Deuteriums für 1 Atom % ca. $600 \mu\text{g}$, Empfindlichkeit der Waage $0.4 \text{ Skt}/\mu\text{g}$, Wägefehler $\pm 20 \mu\text{g}$). Während des Wiegens liess sich über 1 Stunde keine Aenderung des Deuteriumgehaltes der Niobkristalle feststellen. (Wegen einer noch ungeklärten Oberflächenreaktion ist die Desorption von H und D so langsam, dass unterhalb Zimmertemperatur über einige Stunden keine merkliche Abnahme des Deuteriumgehalts auftritt). Unmittelbar vor dem Einbau in die Targetkammer eines Beschleunigers wurden die Kristalle in einem Bad von konz. HNO_3 und konz. HF (Mischungsverhältnis 1 : 1) geätzt, um gestörte Oberflächenbereiche abzutragen, und anschliessend in destilliertem Wasser gespült.

3.2 Einbau und Orientierung der Kristalle

Der Kristall wurde in der Targetkammer elektrisch und thermisch isoliert auf einem Goniometer montiert, das um eine vertikale und eine horizontale Achse gedreht werden konnte (Einstellgenauigkeit der Drehwinkel $\pm 0.1^\circ$), anschliessend die Targetkammer auf $2 \cdot 10^{-6}$ Torr evakuiert. Zur Kondensation von Kohlenwasserstoffen, CO_2 und H_2O im Targetraum, die eine Kontaminierung der Kristalloberfläche verursachen, war das Goniometer von einem zylindrischen Kühlkäfig aus 0.5 mm Kupferblech umgeben, der mit flüssigem Stickstoff gekühlt wurde. Damit liess sich der Druck in der Targetkammer auf $4 \cdot 10^{-8}$ Torr senken. Bei den meisten Versuchen wurde auch der Niobkristall auf 150 K abgekühlt. Dadurch sollte: 1. die Beweglichkeit der Deuteriumatome im Kristall so weit verringert werden, dass diese im wesentlichen nur mehr um die Zwischengitterpositionen schwingen, 2. ein Deuteriumverlust der Probe infolge Desorption verhindert werden, insbesondere eine Verarmung der Oberflächenschichten, die am meisten zur Protonenausbeute beitragen. Wie in Abschnitt 3.1 beschrieben, ist die Desorption bei Zimmertemperatur ungewöhnlich langsam. Der hohe Diffusionskoeffizient sorgt zudem im Kristall für eine rasche Gleichverteilung. Daher konnten auch bei Zimmertemperatur Messungen ohne störenden Deuteriumverlust aus den Kristallen vorgenommen werden.

Der Kristall wurde mit der Rückstreumethode orientiert /28/. Dazu wurde der Kristall einem parallelen Strahl von 300 keV Deuteronen ausgesetzt und die Zahl der rückgestreuten Deuteronen (Öffnungswinkel des Detektors $\sim 10^\circ$) in Abhängigkeit des Winkels ψ zwischen Kristall und Strahl gemessen. Wird bei der Drehung des Kristalles eine Stellung erreicht, in welcher der Strahl parallel zu einer niedrigindizierten Gitterrichtung oder -ebene verläuft, sinkt die Rückstreurate stark ab. Man misst so das Ebenennetz des Kristalles aus und orientiert den Kristall danach. Zur Erhöhung der Genauigkeit des Verfahrens wurden aus dem gesamten Rückstreuspektrum

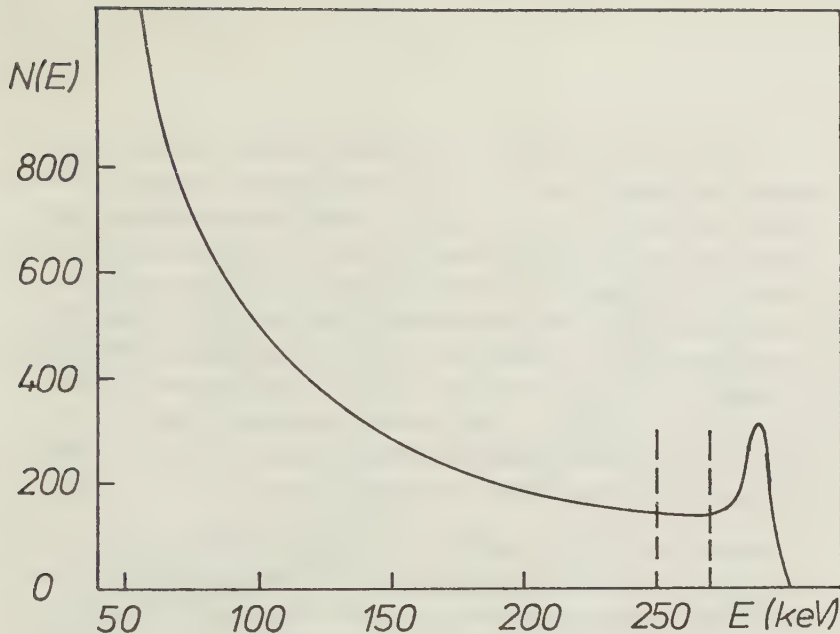


Abb. 6 Energiespektrum rückgestreuter Deuteronen (300 keV) an Niob in $\langle 001 \rangle$

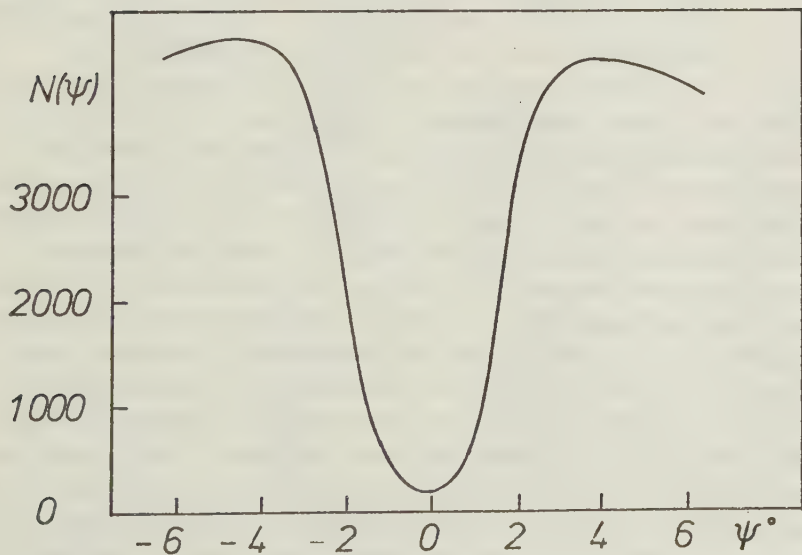


Abb. 7 Rückstreurrate von 300 keV Deuteronen an Niob in Abhängigkeit vom Winkel ψ gegenüber $\langle 001 \rangle$ (Integrationsbereich siehe Abb. 6)

(s. Abb. 6) nur Deuteronen aus einem Energieintervall nahe der Maximalenergie gezählt. Das Kanal/random Verhältnis der Rückstreurrate ist ca. 3 : 100 (je nach Gitterrichtung und Schädigung des Kristalles kann dieses Verhältnis auch grösser werden). Ein Rückstreuprofil ist in Abb. 7 dargestellt.

(ψ = Winkel zwischen Deuteronenstrahl und $\langle 001 \rangle$ Richtung, Deuteronenenergie ~ 300 keV). Die volle Halbwertsbreite des Minimums beträgt in diesem Fall 3.7° . Durch diese Methode liess sich der Kristall mit einer Genauigkeit von $\pm 0.1^\circ$ orientieren. Dieser restliche Fehler rührt in erster Linie vom Spiel des verwendeten Goniometers her.

Die Rückstreuraten wurden mit einem Stromintegrator auf gleiche Bestrahlungsdosen bezogen. Der Deuteronenstrom wurde aus dem elektrischen Strom am Niobkristall bestimmt. Um Ladungsverluste durch Sekundärelektronenemission zu verhindern, wurde der Niobkristall gegenüber der Umgebung (= Erde) auf + 300 V gelegt. Der Deuteronenstrahlstrom betrug zwischen 0.1 und 1 n Ampere, entsprechend einer Stromdichte von 5-50 nA/cm². Die gesamte Flächendosis überstieg nicht 20 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$ entsprechend einer Gesamtflächendosis von $1.25 \cdot 10^{14}$ Deuteronen/cm², um sowohl die Strahlenschädigung des Kristalles als auch die Erhöhung der Deuteriumkonzentration im Kristall durch den einfallenden Strahl gering zu halten. Die Winkeldivergenz des Deuteronenstrahles wurde durch zwei Kreisblenden von je 1.6 mm Durchmesser im Abstand von 90 cm geometrisch auf 0.1° begrenzt. Die Deuteronenrückstreurrate wurde mit einem Siliziumsperrschichtdetektor registriert (Abstand des Detektors vom Kristall ca. 7 cm, Öffnungswinkel ca. 10°). Durch diesen grossen Öffnungswinkel wurde ein so grosser Winkelbereich erfasst, dass sich der Einfluss des "Blocking"effektes bei Drehung des Kristalles herausmittelte. Die Signale aus dem Detektor wurden verstärkt und in einem Vielkanalanalysator nach Impulshöhe sortiert (vgl. das Energiespektrum; Abb. 6). Die Rückstreurrate wurde dann durch Integration über einen Energiebereich von 20 keV ermittelt. Nach der Orientierung des Kristalles konnte der Detektor mit einer Aluminiumabdeckung gegen die höheren Rückstreuraten des eigentlichen Experimentes abgeschirmt werden.

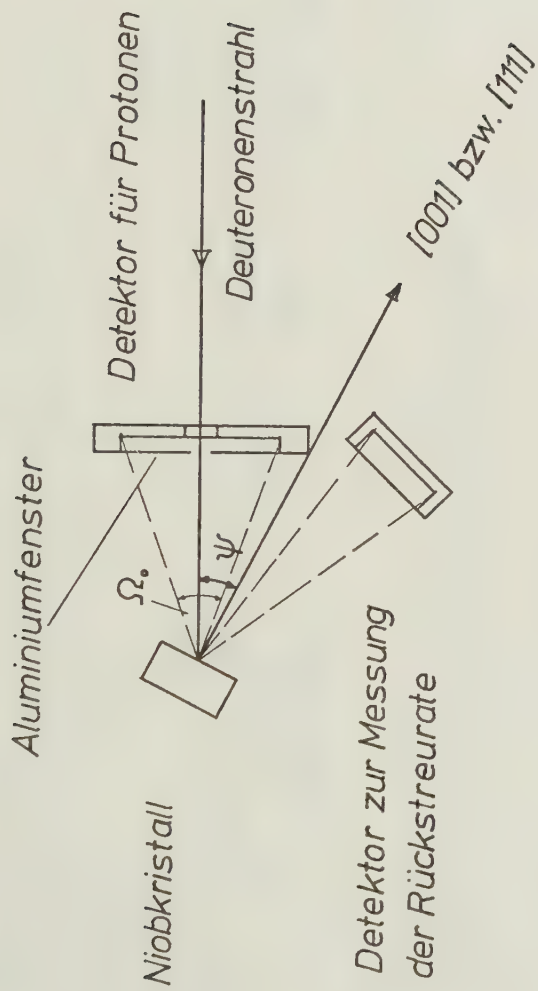


Abb. 8a Messanordnung

KÜHLSYSTEM FÜR KÜHLKÄFIG

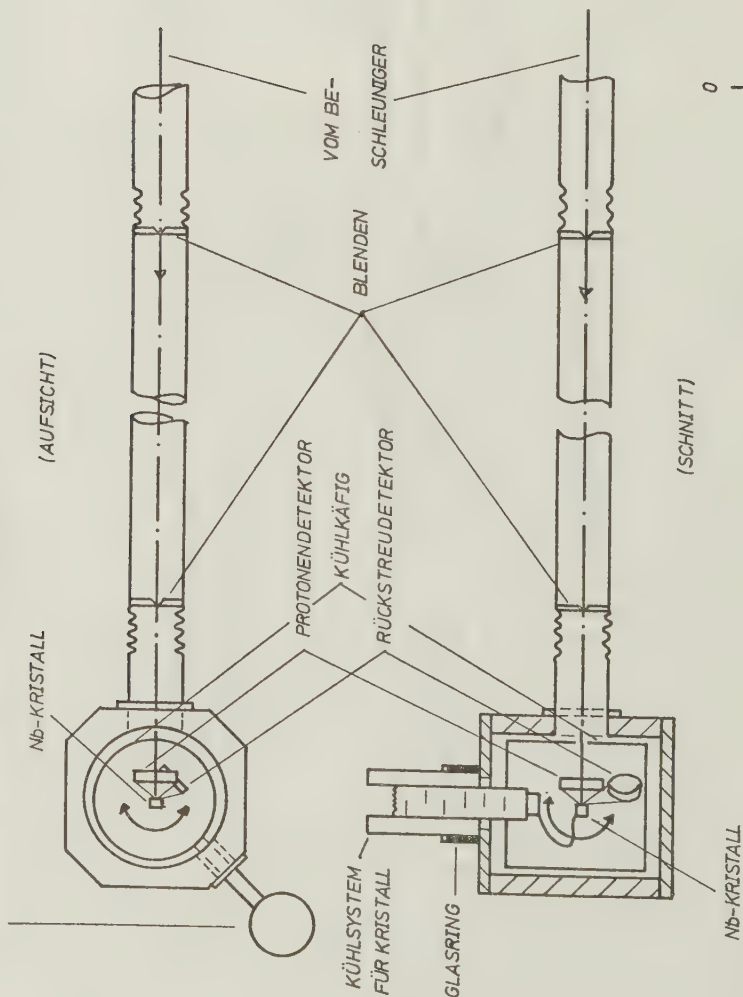


Abb. 8b

Bestrahlungskammer

Aus Gründen der Übersichtlichkeit ist das Goniometer weggelassen. Nb-Kristall und Detektoren nicht massstabsgetreu (größer)

3.3 Versuchsführung

Die beladenen Kristalle wurden mit 300 keV Deuteronen beschossen. Die Winkeldivergenz des Strahles betrug 0.1° (Anordnung siehe Abschnitt 3.2), die bestrahlte Fläche etwa 2 mm^2 . Die Strommessung erfolgte wie in 3.2 beschrieben. Die Protonen der $D(d,p)T$ Reaktion mit einer Energie von 3 MeV wurden mit einem anularen Silizium-Sperrschicht-Detektor registriert, die einzelnen Impulse von einem Vielkanalzähler nach der Impulshöhe analysiert. Ein typisches Energiespektrum der emittierten Protonen ist in Abb. 9 dargestellt. Die Zählraten wurden durch Integration ermittelt und mit einem Stromintegrator auf gleiche Ladungsmengen bezogen. Der Detektor war so ausgerichtet (vgl. Abb. 8), dass seine Zählfläche parallel zur Kristalloberfläche und senkrecht zur Strahlrichtung stand (Abstand der Zählfläche vom Kristall 16 mm, aktive Detektorfläche 300 mm^2 , Raumwinkel aufgespannt vom Detektor 0.88 sr). Der Deuteronenstrahl trifft durch eine kreisförmige Öffnung im Detektor auf den Kristall. Der Detektor war durch $15 \mu\text{m}$ Aluminium vor einer Schädigung durch die zahlreichen rückgestreuten Deuteronen geschützt (Reichweite der 300 keV Deuteronen in Al $\sim 3 \mu\text{m}$; der Energieverlust der 3 MeV Protonen in der Aluminium-Folie beträgt dagegen nur rd. 300 keV). Die Messung der Winkelabhängigkeit der Protonenausbeute wurde bei kleinen Winkeln ψ begonnen ($\psi = 0^\circ$ entspricht Achsenparallelität des Kristalles zum Strahl) und alternierend nach beiden Seiten zu grösseren Winkeln hin fortgesetzt. Dieses Verfahren wurde gewählt, weil bei achsenparallelem Einschuss die Strahlungsschädigung des Kristalles am geringsten ist, und so der Kristall nicht so schnell zerstört wird, wie es bei einem Beginn bei grossen Winkeln ψ beobachtet wurde. Die Deuteronendosis pro Messpunkt wurde durch drei Forderungen bestimmt: 1. Die Zahl der registrierten Protonen pro Messpunkt sollte grösser als 1000 sein, um den statistischen Fehler unter 3 % zu drücken; 2. Die Strahlungsschäden

mussten so klein bleiben, dass die Gitterführung erhalten blieb (Kriterium: geringe Rückstreurate bei achsenparallelem Strahl). 3. Die zusätzliche Beladung des Kristalles durch die eingeschossenen Deuteronen musste klein bleiben im Vergleich zur Gesamtkonzentration an Deuterium. Das begrenzte die Dosis pro Messpunkt auf $1 \mu\text{C}$ (Stromdichte $6 \mu\text{A}/\text{cm}^2$, Fläche 2 mm^2). Wenn alles deponierte Deuterium im durchstrahlten Volumen V ($V \sim 6 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^3$) bliebe (ungünstigster Fall!), würde sich dort der Deuteriumgehalt um $0.0018 \text{ Atom } \%$ erhöhen (relative Zunahme des Deuteriumgehalts ($= 3 \text{ Atom } \%$) : 0.06%). Eine Messreihe bestand bei einer Schrittweite von 0.4° aus bis zu 25 Messpunkten (diese Dosis entspricht einer relativen Zunahme des D-Gehaltes um 1.54% ; die Zählraten brauchen daher nicht korrigiert zu werden). Bei kleinerer Schrittweite (z.T. bis zu 0.09°) waren für eine Messreihe bis zu 140 Einzelmessungen erforderlich. Das liefert eine Erhöhung des D-Gehalts von 3 auf $3.26 \text{ Atom } \%$ (relat. Zunahme 8.6%) und macht eine Korrektur der Zählraten erforderlich. Zudem erwiesen sich die gemessenen Profile als empfindlich gegenüber einer Strahlungsschädigung des Kristalles, wie sie auch von Iferov /7/ beobachtet worden ist. Daher wurde das Kanal/random - Verhältnis der Rückstreurate gemessen, das bei einem ungestörten Niobkristall ca. 3% beträgt und empfindlich auf Schädigung des Kristalles reagiert. Dieses Rückstreuverhältnis blieb bei den verwendeten Messreihen unter 5% .

4 Berechnung der Protonenausbeute

4.1 Protonenausbeute

Ein Deuteronenstrahl mit der Energie E_0 und der Einfallsrichtung $\langle uvw \rangle$ treffe auf die Oberfläche eines Niobeinkristalls. $\psi_{\langle uvw \rangle}$ bezeichne den Winkel zwischen der Oberflächennormalen und $\langle uvw \rangle$. Die Einfallsebene habe die Indices (hkl) . Für eine $[001]$ Oberflächennormale lauten dann die Komponenten von $\langle uvw \rangle$ (Normierung auf Betrag 1):

$$\langle uvw \rangle = \langle -k \sin \psi / (h^2 + k^2)^{1/2}, h \sin \psi / (h^2 + k^2)^{1/2}, \cos \psi \rangle$$

und für die spezielle Einfallsebene $(1\bar{3}0)$, wie sie im Experiment verwendet wird:

$$\langle uvw \rangle = \langle -3 \sin \psi / \sqrt{10}, \sin \psi / \sqrt{10}, \cos \psi \rangle$$

Mit einer $[111]$ Oberflächennormalen und $(hkl) = (01\bar{1})$, dem zweiten Fall des Experiments, besitzt $\langle uvw \rangle$ die Komponenten (Normierung auf Betrag $\sqrt{3}$): $u = \cos \psi - \sqrt{2} \sin \psi$, $v = \cos \psi + \sqrt{2} \sin \psi / 2$, $w = \cos \psi + \sqrt{2} \sin \psi / 2$.

Die Protonenausbeute der $D(d,p)T$ -Reaktion zwischen dem einfallenden Deuteronenstrahl und im Niobkristall gelösten Deuterium ist gegeben durch:

$$Y(E_0, \psi_{\langle uvw \rangle}) = \int_V W(E, \vec{r}) \mathcal{G}(E, \vartheta) b(\vec{r} - \vec{r}') f(\vec{r}) d\vec{r}' dE d\Omega d\vec{r} \quad (4.1.1)$$

$W(E, \vec{r}) dE d\vec{r}$ ist die Zahl an Deuteronen an der Stelle $\vec{r}$ im Raumelement $d\vec{r}$ und im Energieintervall $(E, E+dE)$. $f(\vec{r})$ ist die Verteilung des gelösten Deuteriums im Kristall. Die Integrationen über $d\vec{r}$ und dE erfassen das durchstrahlte Kristallvolumen V bzw. das Energieintervall $0 \leq E \leq E_0$. $\mathcal{G}(E, \vartheta)$ ist der Wirkungsquerschnitt der $D(d,p)T$ Reaktion. Er hängt ab von der Energie E der Deuteronen und vom Winkel ϑ zwischen Beobachtungsrichtung und dem Impuls eines Deuterons. Bei den kleinen

Einschusswinkeln gegenüber einer Gitterrichtung, wie sie im Experiment verwendet werden ($\psi \lesssim 3^\circ$), weicht die Impulsrichtung der eingeschossenen Deuteronen infolge der Gitterführung nur wenig von der Strahlrichtung ab. Daher kann $\mathcal{J}$ näherungsweise durch den Winkel zwischen Strahl- und Beobachtungsrichtung ersetzt werden. Die Integration über $d\Omega$ erstreckt sich somit über den Raumwinkel Ω_0 , den der Detektor aufspannt.

Die Funktion $b(\vec{r})$ mit $\int b(\vec{r}) d\vec{r} = 1$ beschreibt die Abhängigkeit des Wirkungsquerschnittes der Kernreaktion vom Abstand $|\vec{r}|$ zwischen den beiden Deuteronen. Da $\mathcal{G} \sim 10^{-10} \text{Å}^2 \ll a^2 \sim 10 \text{Å}^2$ (a = Gitterkonstante), kann $b(\vec{r})$ durch die Diracsche δ -Funktion ersetzt werden: $b(\vec{r}) \sim \delta(\vec{r})$. Nach Integration über r' in Gleichung (4.1.1) (V' = durchstrahltes Volumen) erhält man:

$$Y(E_0, \psi_{\langle uvw \rangle}) = \int_{V, \Omega_0, E_0} W(E, \vec{r}) \mathcal{G}(E, \mathcal{J}) f(\vec{r}) dE d\Omega d\vec{r} \quad (4.1.2)$$

Die Integration über Ω in Gl. (4.1.2) lässt sich mit Hilfe des Mittelwertsatzes der Integralrechnung durch ein Produkt ersetzen. Man erhält:

$$Y(E_0, \psi_{\langle uvw \rangle}) = \Omega_0 \int_{V, E_0} W(E, \vec{r}) \mathcal{G}(E, \bar{\mathcal{J}}) f(\vec{r}) dE d\vec{r} \quad (4.1.3)$$

mit Ω_0 = Raumwinkel des Detektors. $\bar{\mathcal{J}}$ hängt noch schwach von E ab (vgl. /30/), was aber vernachlässigt werden kann.

Weiter wird $W(E, \vec{r})$ zerlegt in:

$$W(E, \vec{r}) = W(\vec{r}) \cdot p_{\vec{r}}^E(E) \quad (4.1.4)$$

Dabei ist $W(\vec{r}) = \int_0^{E_0} W(E, \vec{r}) dE$ die Ortsverteilung der

Deuteronenflussdichte und $p_{\vec{r}}(E) := W(E, \vec{r}) / \int_0^{E_0} W(E, \vec{r}) dE$

die Energieverteilung der Deuteronen an der Stelle $\vec{r}$,

mit $\int p_{\vec{r}}(E) dE = 1$ für alle $\vec{r}$. Das Energieintervall ΔE , in dem $p_{\vec{r}}(E)$ von Null verschieden ist, ist klein im Vergleich zum Gesamtintervall $(0, E_0)$ (vgl. dazu Abb. 19). Entwickelt man das mit E monoton ansteigende $\mathcal{G}(E)$ im Intervall ΔE nach Potenzen von E :

$$\mathcal{G}(E) = \mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_1 E + \dots \quad (4.1.5)$$

und bricht, da sich $\mathcal{G}$ in einem solchen Energieintervall nur langsam ändert, nach dem linearen Term ab, so erhält man nach Einsetzen von (4.1.4) und (4.1.5) in (4.1.3):

$$Y(E_0, \Psi_{\langle uvw \rangle}) = \Omega_0 \int_V W(\vec{r}) \cdot \mathcal{G}(\bar{E}(\vec{r}), \bar{\mathcal{J}}) \cdot f(\vec{r}) d\vec{r} \quad (4.1.6)$$

$\bar{E}(\vec{r})$ ist die Verteilung der mittleren Deuteronenenergie:

$$\bar{E}(\vec{r}) = \int_{E_0} E p_{\vec{r}}(E) dE \quad (4.1.7)$$

Zur Berechnung der Protonenausbeute Y benötigt man demnach die Fluss- und Energieverteilungen $W(\vec{r})$ und $\bar{E}(\vec{r})$ der Deuteronen im Kristall in Abhängigkeit vom Einschusswinkel $\Psi_{\langle uvw \rangle}$ für die Einschussenergie E_0 , die Verteilung $f(\vec{r})$ der Deuteriumatome im Kristall sowie den Wirkungsquerschnitt der $D(d,p)T$ Reaktion $\mathcal{G}(E, \bar{\mathcal{J}})$ in Abhängigkeit von Energie E und Emissionswinkel $\bar{\mathcal{J}}$.

4.2 Wirkungsquerschnitt der $D(d,p)T$ Reaktion

Beschiesst man Deuterium mit Deuteronen, so erhält man Protonen und Neutronen (bei 250 keV Deuteronenenergie etwa im Verhältnis 2 : 3) gemäss den Reaktionen:

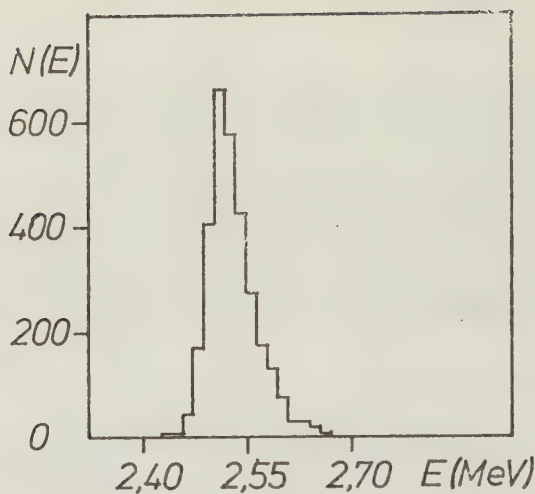


Abb. 9
Energiespektrum
emittierter Pro-
tonen der $D(d,p)T$
Reaktion nach
Passieren einer
 $15\ \mu\text{m}$ Alufolie

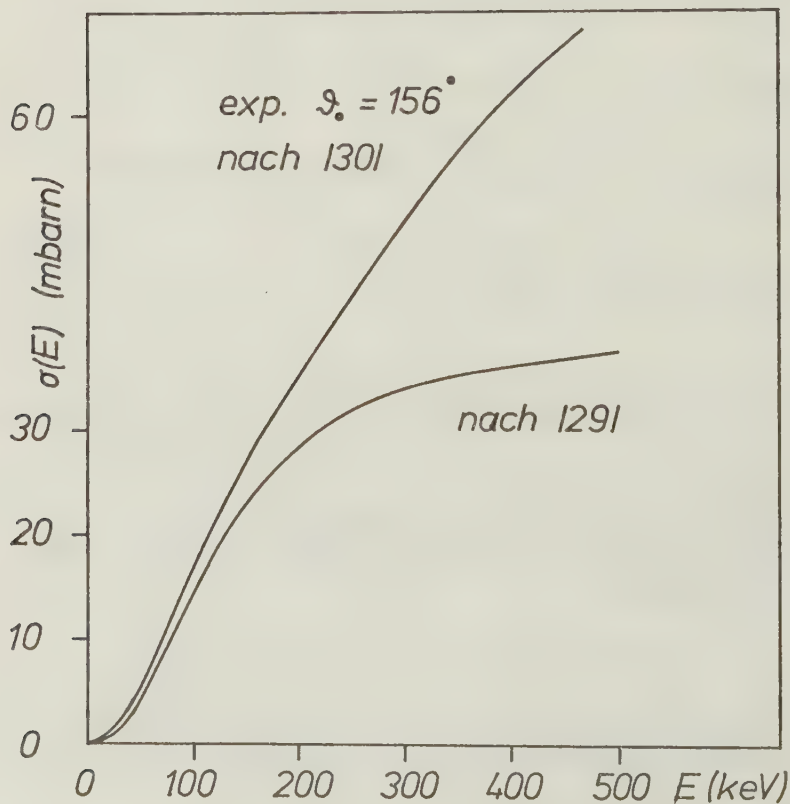
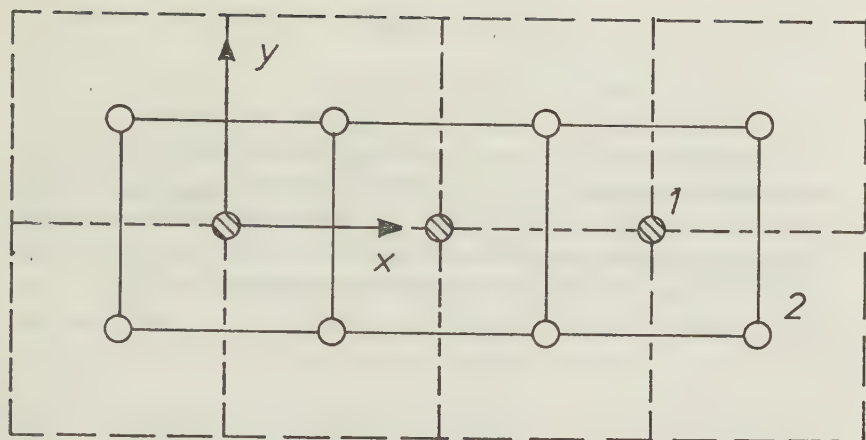


Abb. 10 Wirkungsquerschnitt der $D(d,p)T$ Reaktion (mbarn/ 4π)



a)

$[001]$

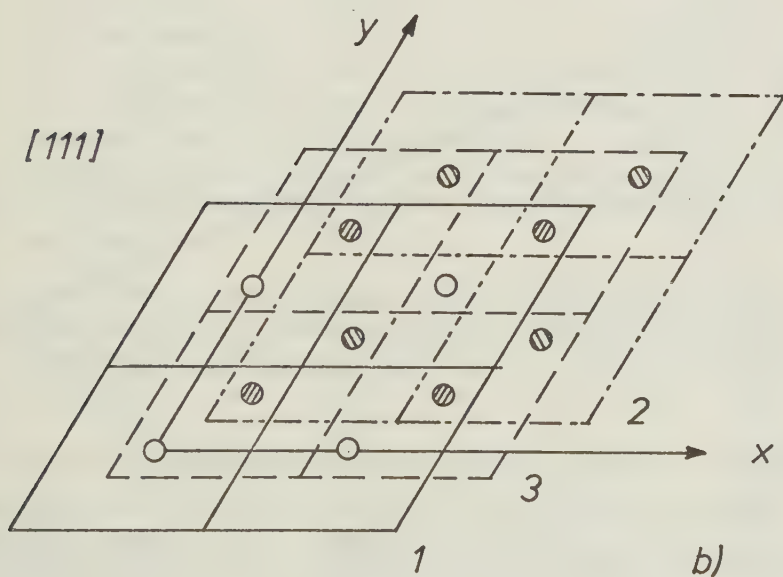
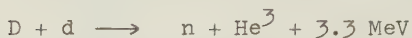
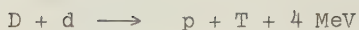


Abb. 11 Projektion der "Streuzellen" auf
a) eine (001) b) eine (111) Ebene



Die Protonen der $D(d,p)T$ Reaktion erhalten demnach eine kinetische Energie von etwa 3 MeV (sofern $E_{\text{Deuterium}} \ll 3 \text{ MeV}$). Der Wirkungsquerschnitt σ beider Reaktionen nimmt mit der Deuteronenenergie zu. Für die $D(d,p)T$ Reaktion ist σ (bis Energien $\approx 150 \text{ keV}$) näherungsweise gegeben durch:

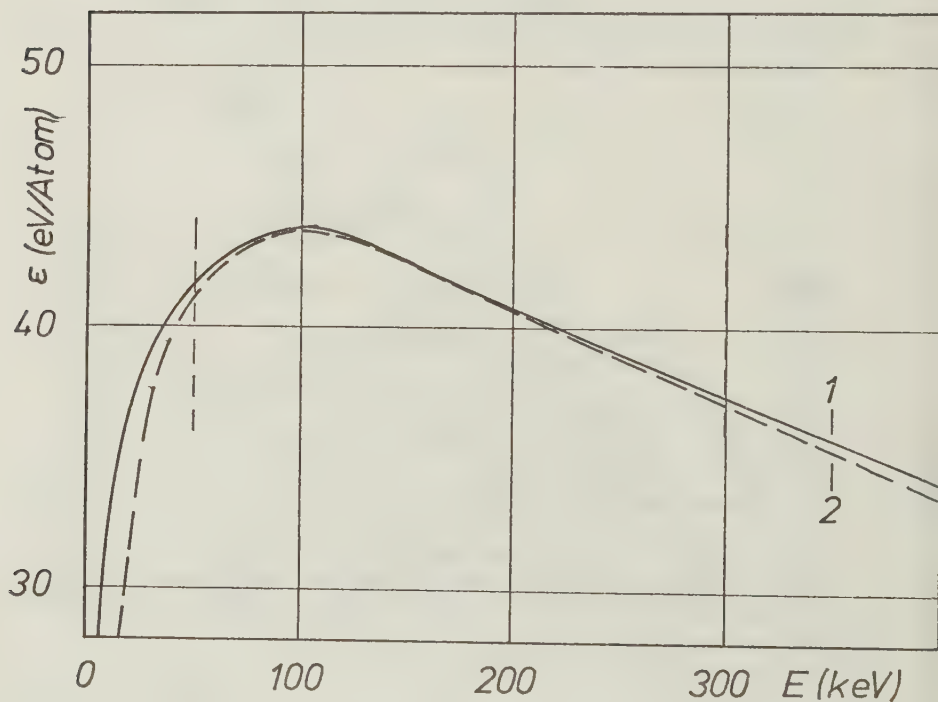


Abb. 12 Elektronischer Energieverlust von Deuteronen in Niob:
 1) nach /43/, 2) Näherungsformel (Gl. 4.4.10)

$$\sigma(E) = (144/E) \exp(-45.8/E^{1/2}) \text{ barn} \quad (4.2.1)$$

mit E in keV (nach /29/) und in Abb. 10 graphisch dargestellt. Für 250 keV Deuteronen beträgt $\sigma \sim 32$ mbarn.

σ zeigt jedoch eine Anisotropie gegenüber dem Winkel zwischen Strahlrichtung und Beobachtungsrichtung der emittierten Protonen (siehe Wenzel und Whaling /30/). Der mittlere Winkel $\bar{\vartheta}$ aus Gl. (4.1.3) beträgt nach der experimentellen Situation $\bar{\vartheta} = 156^\circ$. Der Wirkungsquerschnitt $\sigma(E, \bar{\vartheta})$ für diesen Winkel ist, wie er bei der Berechnung verwendet wird, ebenfalls in Abb. 10 graphisch dargestellt.

4.3 Deuteriumverteilung in Niob

Die Verteilung $f(\vec{r})$ der Deuteriumatome im Niobkristall ist bestimmt durch: 1. die makroskopische, örtliche Verteilung $C(\vec{r})$ des Deuteriums im Kristall (z.B. ein Diffusionsprofil), 2. die speziellen Zwischengitterpositionen $\vec{r}_1$ und 3. die Wahrscheinlichkeitsverteilung $g(\vec{r} - \vec{r}_1)$ der einzelnen Deuteriumatome um diese Positionen. Die speziellen Zwischengitterpositionen (Tetraeder-, Oktaeder- oder Hexaederpositionen) werden in den verschiedenen $\vec{r}_1$ und in den Verteilungen $g(\vec{r} - \vec{r}_1)$ berücksichtigt.

Die Deuteriumatome sind, zumindest bei niedriger Konzentration und in der α -Phase statistisch über die zur Verfügung stehenden Zwischengitterplätze verteilt. $f(\vec{r})$ lässt sich daher schreiben:

$$f(\vec{r}) = C(\vec{r}) \cdot \sum_1 g(\vec{r} - \vec{r}_1) \quad (4.3.1)$$

Die Summation über 1 erstreckt sich über alle Deuterium-Positionen im Kristall. Die makroskopische Deuteriumkonzentration $C(\vec{r})$ hängt nur von z (Bewegungsrichtung der Deuteronen) ab, nicht aber, oder nur in geringem Mass von x und y, da der

Durchmesser des durchstrahlten Gebietes klein ist gegenüber der Ausdehnung des Kristalls ($\sim 1 : 10$). Für Deuterium in Niob ist C zudem nahezu unabhängig von z (vgl. Abschn. 3.1) und wurde deshalb als konstant angesetzt.

Die Verteilung $g(\vec{r})$ ist bestimmt durch die Bewegung der Deuteriumatome im Kristall. Infolge der niedrigen Temperatur von 150 K sind die Deuteriumatome vorwiegend an den Zwischengitterplätzen lokalisiert (siehe die nachfolgende Abschätzung). Das wirksame Kristallpotential ist dann für kleine Auslenkungen aus der Ruhelage nahezu parabolisch: $U(r) = Ar^2$. Mit einem einfachen Modell für Zwischengitterdiffusion lässt sich nach einem allgemeinen Ansatz von Zener die Proportionalitätskonstante A abschätzen: Die Diffusionsbewegung wird als lineare Bewegung in einem periodischen Potential $V(x)$ betrachtet:

$$V(x) = (E_A/2) \cdot \left\{ (\sin(2\pi x/d - \pi/2) + 1) \right\} \quad (4.3.2)$$

d = Abstand zwischen zwei benachbarten Zwischengitterplätzen. Die Potentialdifferenz zwischen Potentialminimum und -maximum wird gleich der Aktivierungsenergie E_A für die Diffusion von Deuterium in Niob gesetzt. Entwickelt man das Potential um eine Ruhelage (z.B. bei $x = 0$) in eine Potenzreihe, so erhält man:

$$V(x) \sim E_A \cdot (\pi x/d)^2 \quad (4.3.3)$$

Für kleine Auslenkungen ist das Potential um die Ruhelage nahezu kugelsymmetrisch und man erhält:

$$U(r) = E_A \cdot (\pi r/d)^2 \quad (4.3.4)$$

Die Bewegung eines Deuteriumatoms in einem solchen Potential ist die eines räumlichen harmonischen Oszillators. Als Wahrscheinlichkeitsverteilung im Grundzustand erhält man eine Gaussverteilung. Das mittlere Amplitudenquadrat für die x-Richtung ist:

$$\langle x^2 \rangle = \hbar d / (2\pi^2 E_A M)^{1/2} \quad (4.3.5)$$

M ist die Masse eines Deuteriumatoms. Mit $E_A = 0.135 \text{ eV} / 22 /$ und $d = a \sqrt{2}/4$ (Tetraederpositionen, Gitterkonstante $a=3.3 \text{ \AA}$) bzw. $d = a/2$ (Okta- und Hexaederpositionen) erhält man für $\bar{x} = \langle x^2 \rangle^{1/2}$: $\bar{x} = 0.18 \text{ \AA}$ (Tetraederpositionen) bzw. $\bar{x} = 0.21 \text{ \AA}$ (Okta- und Hexaederpositionen). Der exakte Wert von E_A und $\bar{x}$ ist nicht sehr kritisch, da $\bar{x}$ von E_A nur mit der 4. Wurzel abhängt und die Protonenausbeute zudem eine integrale Funktion der Deuteriumverteilung ist. Wie Rechnungen mit $E_A = 0.18 \text{ eV}$ statt $E_A = 0.135 \text{ eV}$ gezeigt haben, bleiben die Änderungen im Profil der Protonenausbeute unter 1 %. Zum Vergleich seien neuere Daten für $\bar{x}$ für Wasserstoff angegeben (Messungen für Deuterium existieren noch nicht), die von Birchall und Ross /31/ aus Neutronenbeugungsexperimenten erhalten wurden. Sie sind unter $\bar{x}_H$ in Tabelle 2 für verschiedene Temperaturen eingetragen. Nach Gl. (4.3.5) ist $\bar{x} \propto M^{-1/4}$. Um die Amplituden für Deuterium zu erhalten, hat man demnach $\bar{x}_H$ durch $2^{1/4}$ zu dividieren. Die errechneten Amplituden $\bar{x}_D$ sind ebenfalls in Tabelle 2 eingetragen. Im Vergleich dazu sind die nach obigem Modell berechneten Amplituden etwas grösser. Jedoch erhält z.B. Gissler (zitiert in /31/) für $\text{NbH}_{0.33}$ bei $T = 308^\circ\text{C}$ wesentlich höhere Amplituden (siehe Tabelle 2).

Wie bereits oben erwähnt, ist die Protonenausbeute eine integrale Funktion der Deuteriumverteilung. Daher macht sich diese Unsicherheit in der Grösse von $\bar{x}_D$ bei der Berechnung der Protonenausbeute kaum bemerkbar.

	NbH _{0.14} , Birchall a. Ross /4/				NbH _{0.33} Gissler	hier abgeschätzt	
T [°C]	130	180	250	400	308	-123	22
$\bar{x}_H$ [Å]	0.14	0.18	0.288	0.375	0.425	0.212	0.228
$\bar{x}_D$ [Å]	0.118	0.151	0.242	0.315	0.357	0.178	0.191

Tabelle 2 : Mittlere Schwingungsamplituden von H und D in Nb

Die Energiedifferenz $\hbar\omega$ zwischen zwei Oszillatorniveaus beträgt in diesem Modell:

$$\hbar\omega = \hbar\pi (2E_A/Md^2)^{1/2} \quad (4.3.6)$$

Das ergibt $\hbar\omega = 0.064$ eV für Tetraeder- bzw. $\hbar\omega = 0.045$ eV für Oktaeder- und Hexaederplätze. Das Verhältnis der Besetzungszahlen n_1 und n_0 des ersten Oszillatorniveaus und des Grundzustandes, $n_1/n_0 = \exp(-\hbar\omega/kT)$, beträgt bei 150 K nur 0.007 (Tetraederpositionen) bzw. 0.03 (Okta- und Hexaederpositionen). Demnach ist die Verteilung $g(\vec{r})$ bei 150 K im wesentlichen durch den Grundzustand bestimmt. Bei 295 K ist $n_1/n_0 \sim 0.085$ (Tetraederplätze) bzw. ~ 0.175 (Oktaeder- und Hexaederplätze). Daher ist bei der Berechnung von $\bar{x}$ auch das 1. Oszillatorniveau zu berücksichtigen (Numerische Werte für Tetraederplätze siehe Tabelle 2).

Die Trajektorien geführter Deuteronen verlaufen nahezu parallel zur Kanalrichtung. Daher genügt es, die Projektion $g(\vec{\rho})$ von $g(\vec{r})$ auf die Querebene zur Teilchenbewegung zu berechnen. Man erhält für $g(\vec{\rho})$:

$$g(\vec{\rho})d\vec{\rho} = (2\pi\bar{x}^2)^{-1} \cdot \exp(-\rho^2/2\bar{x}^2) d\vec{\rho} \quad (4.3.7)$$

mit $\bar{x}^2 = \langle x^2 \rangle$ aus Gl. (4.3.5) und für $f(\vec{r})$:

$$f(\vec{r}) = C \sum_i g(\vec{\rho} - \vec{\rho}_i) \quad (4.3.8)$$

Die Summation über i erstreckt sich über die verschiedenen, auf die Querebene projizierten Zwischengitterpositionen.

4.4 Ortsverteilung und Energieverteilung der Deuteronen im Kristall

Orts- und Energieverteilung der Deuteronen sind durch ihre Bewegung im Kristall bestimmt. Beide lassen sich durch geeignete Mittelung aus der Verteilungsfunktion $W(\vec{r}, \vec{p})$ oder auch aus $W(\vec{r}, E)$ der Deuteronen bestimmen. $\vec{r}$ ist hier die Ortskoordinate im Kristall, $\vec{p}$ der Deuteronenimpuls, E die Deuteronenenergie.

1965 hat Lindhard ein Modell vorgestellt /32/, mit dem sich die genannten Verteilungen in einfachen Fällen analytisch berechnen lassen. Jedoch bereitet die Einbeziehung der thermischen Schwingungen der Gitteratome, des Energieverlustes der Ionen im Kristall sowie der Streuung an den Kristallelektronen - selbst unter vereinfachenden Annahmen - erhebliche Schwierigkeiten. Zudem lassen sich die Verteilungen nur noch mit groben Näherungen analytisch ermitteln.

Daher wird in der vorliegenden Arbeit eine andere Methode gewählt. Es werden zunächst die Bahnen einer Anzahl (400-600) von Deuteronen berechnet, die gleichmässig verteilt mit einer Energie E_0 und einem Impuls

$$\vec{p}_{\langle uvw \rangle} = \sqrt{2M_1 E_0} \cdot \langle uvw \rangle / |\langle uvw \rangle| \quad \text{auf eine Niob-Gitter-}$$

struktur treffen. Die Bahnen der Deuteronen sind festgelegt durch den Ort $\vec{r}$ und den zugehörigen Impuls $\vec{p}(\vec{r})$. Durch Mittelung über alle Deuteronenbahnen, die an der Stelle $\vec{r}$ ein Volumen-element ΔV kreuzen, erhält man die Verteilungsfunktion $W(\vec{r}, \vec{p})$ (bzw. $W(\vec{r}, E)$). Die einzelnen Funktionswerte sind mit einem statistischen Fehler behaftet, der von der Zahl der berechneten Deuteronenbahnen und der Grösse von ΔV abhängt. Aus $W(\vec{r}, E)$ lassen sich durch Mittelung andere Verteilungsfunktionen bilden, so die Ortsverteilung der Deuteronen

$$W(\vec{r}) = \int_0^E W(\vec{r}, E) dE \quad \text{oder die Ortsverteilung der mittleren}$$

Teilchenenergie $\bar{E}(\vec{r}) = \int_0^{E_0} E \cdot W(\vec{r}, E) dE$. Der Nachteil der

Methode liegt darin, dass die Verteilungen so nur für eine bestimmte Ionenart einer bestimmten Einschussenergie in einem bestimmten Kristallgitter usw. ermittelt werden können.

Zur Berechnung der Deuteronenbahnen wird die Kristallstruktur so in Zellen (Parallelepipede) zerlegt, dass im Zentrum jeder Zelle genau ein Atom sitzt (bezgl. der Wahl der Zellen in $\langle 001 \rangle$ und $\langle 111 \rangle$ vgl. Abb.11). Es werden sukzessive für die Eintrittsgrößen $\vec{p}_1$ und $\vec{r}_1$ eines Teilchens in die i-te Zelle deren Änderungen $\Delta \vec{p}_1$ und $\Delta \vec{r}_1$ infolge der Wechselwirkung mit dem Targetatom und den Elektronen in der Zelle berechnet. Daraus ergeben sich die Größen $\vec{p}_{i+1} = \vec{p}_1 + \Delta \vec{p}_1$ und $\vec{r}_{i+1} = \vec{r}_1 + \Delta \vec{r}_1$ als Eintrittsgrößen in die i+1 - te Zelle. Diese Prozedur wird über n Zellen fortgeführt. n ist so gewählt, dass die restliche kinetische Energie $p_n^2/2 M_1$ der Teilchen nicht mehr merklich zur $D(d,p)T$ Reaktion beiträgt. Bei 50 keV ist dieser Beitrag $< 3\%$.

Die Streuung von Ionen an einem Einzelatom kann klassisch berechnet werden, wenn die Bedingung $K = 2 Z_1 Z_2 e^2 / \hbar v > 1$ (Coulombstreuung, vgl. /32/) erfüllt ist (Z_1, Z_2 = Ordnungszahl des Projektils bzw. streuenden Atoms, e = Elementarladung, v = Geschwindigkeit des Projektils). Für die Streuung von 300 keV Deuteronen an Niob ($Z_1 = 1, Z_2 = 41$) erhält man : $K = 33.5 > 1$ und für 50 keV : $K = 82 > 1$, was eine klassische Behandlung der Streuung rechtfertigt.

4.4.1 Streuung an den Kristallatomen

Es werden folgende Näherungen gemacht: Innerhalb einer Zelle wird nur das Potential des Zellenatoms berücksichtigt, der Einfluss der Nachbaratome vernachlässigt, d.h. die Streuung an den Kristallatomen wird als eine Folge von Streuungen

an Einzelatomen behandelt. Der Einfluss der Nachbaratome ist gering, wenn das Teilchen die Zelle nahe der Mitte, also mit kleinem Stossparameter s ($s \ll a/2$, a = Gitterkonstante) zum Zellenatom durchquert, wobei die Wechselwirkung gross ist. Für grosse Stossparameter ($s \sim a/2$, das Teilchen passiert die Zelle nahe ihrem Rand) ist zwar der Einfluss des Nachbaratoms fast gleich gross wie der des Zellenatoms, jedoch der Streuwinkel nahezu 0. Z.B. beträgt der Streuwinkel ϑ für 300 keV Deuteronen in Niob bei $s = a/20$: $\vartheta \sim 0.38^\circ$, dagegen bei $s = a\sqrt{3}/2$ (halber Abstand des nächsten Nachbarn) nur: $\vartheta = 8.3 \cdot 10^{-5}^\circ$.

Es ist nicht notwendig, die Bahn der Deuteronen für jeden Ort $\vec{r}$ innerhalb der Zelle zu berechnen. Die Bahnwinkel ψ zur Atomkette sind bei Gitterführung so klein ($\psi \lesssim \psi_c \sim 1.9^\circ$ für 300 keV Deuteronen in Niob), dass sich der Abstand von der Atomkette beim Durchqueren einer Zelle nur wenig ändert ($\Delta r \ll a/2$). Es genügt daher die Richtung der Bahnasymptoten zu berechnen, die durch den Streuwinkel ϑ der Streuung am Einzelatom festgelegt wird. Die Trajektorie wird so konstruiert, dass man das Teilchen geradlinig in die Zelle laufen lässt, es dort an der Stelle der nächsten Annäherung s ($\sim$ Stossparameter) zum Atom um den Winkel $\vartheta(s)$ ablenkt und es dann weiter geradlinig aus der Zelle hinaus laufen lässt.

Für ein nicht relativistisches Teilchen beträgt der Streuwinkel φ im Schwerpunktsystem (S. S., vgl. z.B. /33/):

$$\varphi = \pi - 2 \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{s}{r^2} \frac{dr}{(1 - v(r) - s^2/r^2)^{1/2}} \quad (4.4.1)$$

mit r = Abstand zwischen Teilchen und Streuatom, $r_{\min}$ = minimaler Abstand vom Streuatom (= das r , für welches die Wurzel in Gl. (4.4.1) verschwindet), $v(r) = V(r)/E_r$, mit $V(r) =$

potentielle Energie des Teilchens im Feld des streuenden Atomes, $E_r = E \cdot M_2 / (M_1 + M_2)$ = kinetische Energie der Relativbewegung. Die Masse M_1 eines Deuterons ist $\sim M_2/50$, M_2 = Masse des Niobatoms. Daher gilt: $E_r \sim E$, E = kinetische Energie des Deuterons. Den Streuwinkel $\mathcal{V}$ im Laborsystem (L.S.) erhält man aus:

$$\tan \mathcal{V} = \sin \varphi / (\cos \varphi + M_1/M_2) \quad (4.4.2)$$

Wegen $M_1/M_2 \sim 1/50$ ist $\tan \mathcal{V} \sim \tan \varphi$.

Für hohe Teilchenenergien und kleine Streuwinkel $\mathcal{V}$ (wie sie für Channeling typisch sind), kann der Streuwinkel in Impulsnäherung (vgl. dazu /33/) berechnet werden. Man gelangt so von Gl. (4.4.1) zu:

$$\mathcal{V}(s) = -\frac{1}{2E} \cdot \frac{\partial}{\partial s} \int_{-\infty}^{+\infty} V(\sqrt{z^2 + s^2}) dz \quad (4.4.3)$$

Als Streupotential wurde die Molieresche Näherung zum Thomas-Fermi-Potential verwendet (/34/):

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi(r/a_{TF}) \quad (4.4.4)$$

$$\text{mit: } \Phi(r/a_{TF}) = \sum_{i=1}^3 \alpha_i \exp(-\beta_i r/a_{TF})$$

Z_1, Z_2 = Kernladungszahl des Deuterons bzw. Niobatoms,
 $a_{TF} = 0.8853 \cdot a_B \cdot Z_2^{-1/3}$ = Thomas-Fermi-Abschirmradius,
 a_B = Bohrscher Radius des Wasserstoffatoms. Die Koeffizienten lauten:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 0.10; & \alpha_2 &= 0.55; & \alpha_3 &= 0.35; \\ \beta_1 &= 6.0; & \beta_2 &= 1.2; & \beta_3 &= 0.3; \end{aligned}$$

Mit $e^2/2a_B = E_R = \text{Rydberg-Energie}$ und $V(r)$ aus Gl. (4.4.4) erhält man so für $\mathcal{V}$:

$$\mathcal{V} = Z_1 Z_2 \frac{E_R}{E} \frac{2a_B}{a_{TF}} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \beta_i K_1(\beta_i s/a_{TF}) \quad (4.4.5)$$

$K_1(\alpha)$ ist die modifizierte Besselfunktion 1. Ordnung (vgl. z.B. /35/). Zur Abschätzung der Genauigkeit der Impuls-näherung kann nach Lehmann und Leibfried /33/ der Näherungs-term 2. Ordnung $\Delta\mathcal{V}$ verwendet werden. Für das Verhältnis $\Delta\mathcal{V}/\mathcal{V}$ erhält man bei einem abgeschirmten Coulomb-Potential der Form $A(a_{TF}/r)\exp(-r/a_{TF})$ mit $A = Z_1 Z_2 e^2/a_{TF}$ (das Moliere-Potential ist eine Summe solcher Potentiale):

$$\Delta\mathcal{V}/\mathcal{V} = (A/E) \cdot K_1(2s/a_{TF})/K_1(s/a_{TF}) \quad (4.4.6)$$

und für das Moliere-Potential (Gl.(4.4.4)):

$$\frac{\Delta\mathcal{V}}{\mathcal{V}} = \frac{A}{E} \frac{\sum_{i=1}^3 \alpha_i \beta_i K_1(2\beta_i s/a_{TF})}{\sum_{i=1}^3 \alpha_i \beta_i K_1(\beta_i s/a_{TF})} \quad (4.4.6a)$$

Für die Streuung von Deuteronen an Niobatomen ist $A=4.34 \text{ keV}$. Werte für $\mathcal{V}$, zugehörigen Stossparameter s und $\Delta\mathcal{V}/\mathcal{V}$ sind in Tabelle 3 für $E = 300 \text{ keV}$ und $E = 50 \text{ keV}$ angegeben. Damit ist die Impulsnäherung selbst für Energien von 50 keV und Stossparameter von $\sim 0.03 \text{ \AA}$ noch eine gute Näherung.

	ϑ^0	20	2	0.2	0.02	0.002
300 keV	s [a _{TF}]	0.041	0.35	1.76	5.5	11.6
	$\Delta\vartheta/\vartheta$	$7.1 \cdot 10^{-3}$	$6.0 \cdot 10^{-3}$	$3.8 \cdot 10^{-3}$	$1.78 \cdot 10^{-3}$	$3.0 \cdot 10^{-4}$
50 keV	s [a _{TF}]	0.22	1.30	4.48	10.1	16.8
	$\Delta\vartheta/\vartheta$	$3.8 \cdot 10^{-2}$	$2.5 \cdot 10^{-2}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$2.8 \cdot 10^{-3}$	$3.8 \cdot 10^{-4}$

Tabelle 3: Gültigkeit der Impulsnäherung für ein Molier-Potential

4.4.2 Thermische Schwingungen der Gitteratome

Die Positionen der Gitteratome weichen infolge thermischer Schwingungen von den Gleichgewichtslagen ab. Diese Verrückungen sind bei der Berechnung des Stossparameters und des Streuwinkels zu berücksichtigen. Dabei kann die Eigenbewegung der Gitteratome gegenüber der hohen Geschwindigkeit der Deuteronen vernachlässigt werden (aus $m\bar{v}^2/2 = 3 kT$, erhält man für $T = 150 \text{ K}$: $\bar{v} \sim 2.8 \cdot 10^4 \text{ cm/s}$; zum Vergleich: die Geschwindigkeit von 50 keV Deuteronen beträgt $2.1 \cdot 10^8 \text{ cm/s}$). Die Amplituden der thermischen Schwingungen nach dem Debye-Modell sind (vgl. z.B. /36/)

$$\langle r^2 \rangle = \frac{9 \hbar^2}{M k T_D} \left\{ 1/4 + (1/X_D) \cdot \Phi(X_D) \right\} \quad (4.4.7)$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Abstand r vom Schwingungsmittelpunkt ist:

$$p(r) d\tau = \frac{1}{\langle r^2 \rangle (2\pi)^{3/2}} \exp(-r^2/2\langle r^2 \rangle) d\tau \quad (4.4.8)$$

M = Masse der Niobatome, k = Boltzmann-Konstante, T_D = Debye-Temperatur von Niob ($\sim 275 \text{ K}$) und $X_D = (T_D/T)$. $\Phi(X_D)$ ist die Debyefunktion.

Für $T = 150 \text{ K}$ ist $\langle r^2 \rangle = 0.0102 \text{ \AA}^2$, $\langle x^2 \rangle = (1/3) \cdot \langle r^2 \rangle = 0.0034 \text{ \AA}^2$ und $\bar{x} = \langle x^2 \rangle^{1/2} = 0.058 \text{ \AA}$.

Insgesamt ist der Einfluss thermischer Schwingungen auf den Gitterführungseffekt bei Deuteronenenergien von 300 keV und weniger klein, so dass die Debyesche Näherung ausreicht (so beträgt der minimale Abstand der geführten Deuteronen von den Atomreihen $r_{\min} \sim a_{\text{TF}} = 0.136 \text{ \AA}$, dagegen $\bar{x} \sim 0.058 \text{ \AA}$). Deshalb ist es für die Berechnung der Trajektorien gerechtfertigt, eine isotrope Schwingungsbewegung der Deuteriumatome anzunehmen. Korrelationen der Schwingungen benachbarter Gitteratome konnten ebenfalls unberücksichtigt bleiben. Theoretische Berechnungen dieser Korrelation:

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle / \langle x^2 \rangle = 2 (1 - \beta)$$

(β = Korrelationskoeffizient, x_1 und x_2 die Auslenkungen benachbarter Atome) von G. Barsch (/50/, S. 96) mit Hilfe des Debyemodells liefern für einfache kubisch raumzentrierte Materialien Korrelationskoeffizienten β zwischen 0.159 ($T=0$) und 0.442 ($T \gg T_D$). Korrelationskoeffizienten dieser Grösse haben jedoch keinen merklichen Einfluss auf die Gitterführung von schnellen Ionen, wie Rechnungen von V. Lottner gezeigt haben /37/.

4.4.3 Energieverlust der Deuteronen in Niob

Schnelle, nicht relativistische Ionen verlieren in einem Festkörper ihre kinetische Energie im wesentlichen durch zwei Vorgänge: durch Stosswechselwirkung mit den Kristallatomen (nuklearer Energieverlust) und durch Wechselwirkung mit den Elektronen (elektronischer Energieverlust). Im Energiebereich von 50 - 300 keV ist der Anteil des nuklearen Energieverlusts vergleichsweise gering (weniger als 1 % des elektronischen Energieverlusts, vgl. Tabelle 4). Er wurde deshalb gegenüber dem elektronischen Energieverlust vernachlässigt.

E	keV	50	100	200	400
$(dE/dx)_n$	eV/Atom	0.234	0.155	0.107	0.090
$(dE/dx)_e$	eV/Atom	41.6	43.8	40.6	34.8

Tabelle 4 : Nuklearer und elektronischer Energieverlust von Deuteronen in Niob

Bei hohen Geschwindigkeiten, $v > v_0$ (für Deuteronen in Niob : $M_1 v_0^2/2 \sim 100$ keV, nach Brandt und Reinheimer /51/) besteht der elektronische Energieverlust aus zwei Beiträgen: (1) einem Beitrag von Einzelstössen des Teilchens mit Elektronen und (2) einem Beitrag durch kollektive Wechselwirkung mit den Elektronen (Anregung von Plasmaschwingungen). Der erste ist abhängig von der lokalen Elektronendichte, der zweite dagegen in erster Näherung proportional zur mittleren Elektronendichte und damit ortsunabhängig.

Für $v > v_0 Z_2^{1/2}$ (Deuteronen in Niob : $E > 2$ MeV) und $v > v_0 Z_1^{2/3}$ (für Deuteronen: $E > 50$ keV) hat Lindhard 1965 eine Beziehung angegeben, die dieser Zweiteilung Rechnung trägt /32/:

$$\frac{dE}{dx} (E, \vec{r}) = \mathcal{E} (E, \vec{r}) = \mathcal{E}_r(E) \left\{ (1-\alpha) + \alpha \cdot \mathcal{G}(\vec{r})/NZ_2 \right\} \quad (4.4.9)$$

Die Ortsabhängigkeit des Beitrags von Einzelstössen mit Elektronen ist durch die Proportionalität zur Elektronendichte $\mathcal{G}(\vec{r})$ berücksichtigt (N = Zahl der Niobatome pro cm^3 , $\mathcal{E}_r(E)$ = random-Energieverlust, d.h. der Energieverlust, den ein Teilchen in einem polykristallinen Material erleidet). α ist ein Parameter ($1/2 \leq \alpha \leq 1$), welcher den Anteil der Einzelstösse am Energieverlust bestimmt. Nach Lindhard /32/ nähert sich α umso mehr $1/2$, je grösser das Verhältnis $v/(v_0 Z_2^{1/2})$ ist.

Im hier interessierenden Energieintervall (50 - 300 keV) existieren z.Z. noch keine theoretischen Rechnungen, welche die Ortsabhängigkeit des Energieverlusts berücksichtigen. Daher wurde, Lindhards Ansatz in Gl. (4.4.9) folgend, der Beitrag der Einzelstösse zum Energieverlust als proportional zur lokalen Elektronendichte angesetzt. Der Koeffizient α , der die Grösse dieses Beitrages bestimmt, wurde gleich 1/2 gesetzt. Nach Tabelle 5, die nach Rechnungen von Brandt und Reinheimer /51/ erstellt wurde, scheint dies zumindest was die hohen Energien (~ 300 keV) betrifft, keine allzu schlechte Näherung zu sein.

E keV	70	110	175	275	441
α	1.0	0.89	0.76	0.71	0.67

Tabelle 5 : Anteil der Einzelstösse am elektronischen Energieverlust (nach /51/, Deuteronen in Niob)

Der random-Energieverlust ϵ_r von Deuteronen in Niob ($Z_2=41$) wurde durch Interpolation zwischen den Werten ϵ_r in Zirkon ($Z_2 = 40$) und ϵ_r in Molybdän ($Z_2 = 42$) erhalten, die beide in /43/ tabelliert sind. Die Energieabhängigkeit von ϵ_r lässt sich im Bereich 50 - 300 keV gut durch die Funktion:

$$\epsilon_r(E) = a_1 E / (E^2 + a_2 E + a_3) \quad (4.4.10)$$

annähern (s. Abb. 12), die als einfache analytische Funktion für numerische Rechnungen besonders geeignet ist (a_1, a_2, a_3 sind durch Anpassung zu bestimmende Koeffizienten; die Abweichungen sind im betrachteten Energiebereich kleiner als 1 %).

Weiter wurde die lokale Elektronendichte $\varrho(\vec{r})$ durch die mittlere Elektronendichte $\bar{\varrho}(s)$ ersetzt, die ein Deuteron sieht, wenn es ein Niobatom im Abstand s ($\sim$ Stossparameter) passiert:

$$\bar{\rho}(s) = 1/d \int_{-d/2}^{+d/2} \rho(\sqrt{s^2+z^2}) dz \quad (4.4.11)$$

Man erhält damit:

$$\varepsilon(E,s) = \varepsilon_r(E) \left\{ (1-\alpha) + \alpha \cdot \bar{\rho}(s)/NZ_2 \right\} \quad (4.4.12)$$

Die Elektronendichte in einem Atom $\rho(r)$, wurde aus dem Thomas-Fermi-Modell berechnet (s. Gl. (4.4.4.)):

$$\rho(r) = \frac{\Delta U(r)}{4\pi e} = \frac{Z_2}{4\pi r} \sum_{i=1}^3 (\alpha_i \beta_i^2 / a_{TF}^2) \exp(-\beta_i r / a_{TF}) \quad (4.4.13)$$

Nach Gl. (4.4.11) erhält man dann:

$$\bar{\rho}(s) = \frac{1}{d} \cdot \frac{Z_2}{2\pi} \sum_{i=1}^3 (\alpha_i \beta_i^2 / a_{TF}^2) K_0(\beta_i s / a_{TF}) \quad (4.4.14)$$

wobei die Integrationsgrenzen (s. Gl. (4.4.11)) ohne merklichen Verlust an Genauigkeit von $\pm d/2$ auf $\pm \infty$ ausgedehnt wurden,

4.4.4 Streuung an Elektronen

Die Stösse der Deuteronen mit einzelnen Elektronen haben eine Kleinwinkelstreuung der Deuteronen durch Impulsübertrag zur Folge. Die Winkel sind um die Richtung des Primärimpulses annähernd Gauss-verteilt mit einem mittleren quadratischen Streuwinkel $d\langle \mathcal{J}^2 \rangle$ pro durchlaufener Strecke dz (vgl. z.B. /44/):

$$d\langle \mathcal{J}^2 \rangle = \frac{m_e}{M_1} \cdot \frac{1}{E} \cdot \varepsilon_s \cdot dz \quad (4.4.15)$$

ε_s ist der Anteil des elektronischen Energieverlusts, der von Einzelstößen mit Elektronen herrührt. Die Abbremsung durch kollektive Stöße ist symmetrisch zum Primärimpuls und hat daher in erster Näherung keine Richtungsänderung zur Folge.

Mit ε_s aus Gl. (4.4.12) erhält man:

$$d\langle \mathcal{J}^2 \rangle = \frac{m_e}{M_1} \cdot \frac{1}{E} \cdot \alpha \cdot \varepsilon_r \cdot \bar{\rho}(s)/NZ_2 \, dz \quad (4.4.16)$$

4.4.5 Streuung an gelöstem Deuterium

Der differentielle Wirkungsquerschnitt $d\sigma/d\mathcal{J}$ für die Streuung eines Deuterons an einem ruhenden Deuteriumatom beträgt im Laborsystem (L.S.):

$$d\sigma/d\mathcal{J} = 2\pi (e^2/E)^2 \cos \mathcal{J} / \sin^3 \mathcal{J} \quad (4.4.17)$$

$\mathcal{J}$ = Streuwinkel im L.S., E = kinetische Energie des einfallenden Deuterons (L.S., vgl. z.B. /45/). Der Wirkungsquerschnitt $\Delta\sigma$ für Streuwinkel $\mathcal{J} > \mathcal{J}_1 = \psi_1 \sim 1.9^\circ$ (ψ_1 = Grenzwinkel für Gitterführung) errechnet sich zu:

$$\Delta\sigma = \int_{\mathcal{J}_1}^{\pi/2} (d\sigma/d\mathcal{J}) d\mathcal{J} = \quad (4.4.18)$$

$$= \pi (e^2/E)^2 (1/\sin^2 \mathcal{J}_1 - 1) \sim 1.9 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}^2$$

Für reine β -Phase ist das Atomverhältnis Nb : D $\sim 1 : 1$, so dass ein Deuteron auf einer Strecke von 2μ im Niobkristall ($\sim$ Reichweite der Deuteronen) etwa 12 000 Deuteriumatome passiert. Berücksichtigt man noch die Flussüberhöhung in der Kanalmitte (etwa Faktor 5), so erhält man mit der Annahme, dass alle gelösten Deuteriumatome in der Kanalmitte sitzen,

(ungünstigster Fall), als Wirkungsquerschnitt für Streuwinkel $\vartheta > \vartheta_1$: $\Delta\sigma_{\text{total}} = 0.115 \text{ \AA}^2$. Das Verhältnis von $\Delta\sigma_{\text{total}}$ zur Fläche F , auf die rund 80 % des Deuteronenflusses fallen ($F \sim a^2/3 = 3.6 \text{ \AA}^2$) beträgt: $\Delta\sigma_{\text{total}}/F \sim 0.03$.

Die Deuteronenkonzentration des Experiments beträgt ca. 3 Atom %. Bei 295 K (reine α -Phase) sind die Deuteriumatome statistisch über die Zwischengitterplätze verteilt und man erhält: $\Delta\sigma_{\text{tot}}/F \sim 9 \cdot 10^{-4}$. Bei 150 K liegt eine Mischung von α - und β -Phase vor (s. Abschnitt 2). Der Wert von $\Delta\sigma_{\text{tot}}/F$ ist je nach der Bahn der einzelnen Deuteronen verschieden, liegt aber zwischen den Grenzwerten 0.03 (100 Atom % Deuterium) und $1.3 \cdot 10^{-5}$ (0.043 Atom % Deuterium, vgl. Abschnitt 7.1). Die Streuung an den gelösten Deuteriumatomen spielt somit bei den Deuteriumkonzentrationen des Experiments nur eine geringe Rolle.

4.5 Modell-Rechnung

Das Rechenprogramm benötigt als "statistisches" Programm viel Rechenzeit - es werden pro Einschusswinkel bis zu 576 Deuteronenbahnen berechnet. Zur Verkürzung wurden daher Näherungen verwendet; auf Terme 2. Ordnung wurde vielfach verzichtet. Komplizierte Funktionen wurden tabelliert und im Rechenprogramm als Felder vereinbart. Bei genügend dichtem Stützstellenabstand konnte auf Interpolation verzichtet werden, so z.B. beim stossparameterabhängigen Teil des Streuwinkels (im Programm: TA) und des elektronischen Energieverlustes (im Programm: SIL). Im folgenden werden die Bezeichnungen des Rechenprogramms in Grossbuchstaben geschrieben und in Klammern beigelegt.

4.5.1 Wahl der Streuzelle

Die "Streuzelle" in der jeweiligen Gitterrichtung und ihre Projektion auf die Transversalebene zeigt Abb. 11. Um einfache Randbedingungen zu erhalten, konnte nicht die Wigner-Seitz-Zelle verwendet werden.

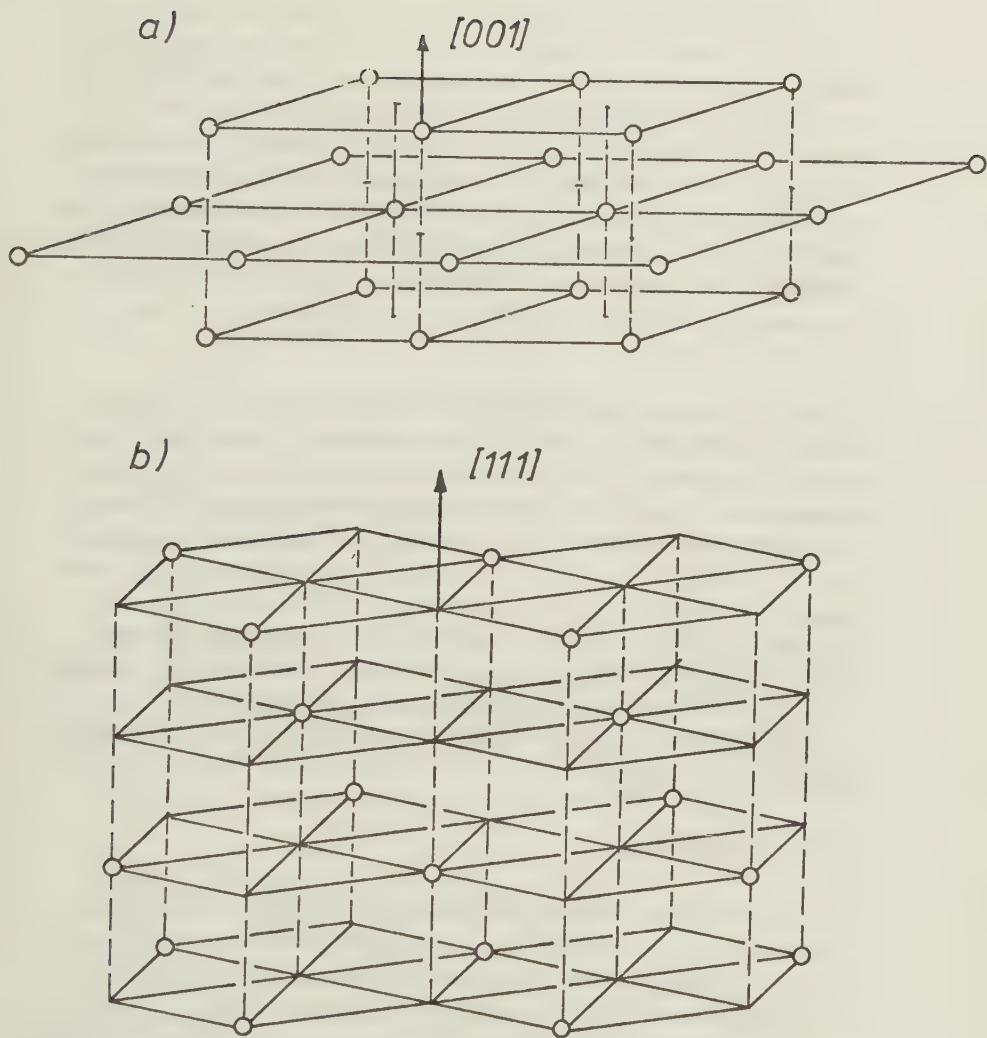


Abb. 13 Atomlagen im kubischraumzentrierten Gitter
senkrecht zu a) $\langle 001 \rangle$, b) $\langle 111 \rangle$

In $\langle 001 \rangle$ wurde ein Quadrat mit der Kantenlänge $a = 3.294 \text{ \AA}$ gewählt. Die z-Achse eines rechtwinkligen Koordinatensystems (mit Ursprung in Quadratmitte = Atomposition) wurde in $[001]$ gelegt, die x- und y-Achse in $[100]$ bzw. $[010]$. Die x,y-Ebene ist Transversalebene zur Teilchenbewegung. Die nächste von Atomen besetzte Ebene liegt im Abstand $\Delta z = a/2$ darunter, die Atompositionen darin sind um $\Delta x = a/2$, $\Delta y = a/2$ gegenüber der vorhergehenden verschoben. Die Atompositionen in der dritten Atomlage decken sich mit denen der ersten Lage (vgl. auch Abb. 13).

In $\langle 111 \rangle$ wurde als Projektion der Streuzelle auf die (111) Ebene eine 60° Raute gewählt (Kantenlänge $a\sqrt{2} = 4.67 \text{ \AA}$, siehe Abb. 11), wieder mit dem Niobatom in Zellenmitte. Die x,y-Achsen eines schiefwinkligen Koordinatensystems mit Ursprung in Zellenmitte wurden in Richtung der Rautenkanten gelegt, die z-Achse in $[111]$. In dieser Richtung gibt es drei verschiedene Atomlagen im Abstand von jeweils $\Delta z = a\sqrt{3}/6 \sim 0.95 \text{ \AA}$ voneinander, so dass sich erst wieder die 4. Atomlage mit der ersten deckt. Die Atompositionen in zwei aufeinanderfolgenden Lagen sind im schiefwinkligen Koordinatensystem um $\Delta x = 2a\sqrt{2}/3 \sim 3.10 \text{ \AA}$ und $\Delta y = 2a\sqrt{2}/3 \sim 3.10 \text{ \AA}$ gegenüber verschoben.

4.5.2 Eingabedaten

Die Deuteronen starten gleichmässig verteilt von der Oberfläche der ersten Streuzelle. Dazu wird diese bei $\langle 001 \rangle$ in 20×20 gleiche Quadrate der Kantenlänge $a/20$, bei $\langle 111 \rangle$ in 24×24 gleiche 60° -Rauten der Kantenlänge $a\sqrt{2}/24$ geteilt. Die Mitten der Felder sind jeweils die Startpositionen der Deuteronen. Die Feldeinteilung dient gleichzeitig als Ausgabegeraster für die Fluss- und Energieverteilung der Deuteronen. Die Minimalzahl an Rasterfeldern ist durch die gewünschte Auflösung der Fluss- und Energieverteilung und durch die Gittersymmetrie bestimmt. Die Zahl der einfallenden Deuteronen

war gleich der Zahl der Rasterfelder, d.h. 400 bei $\langle 001 \rangle$ und 576 bei $\langle 111 \rangle$.

Eintrittsort (XFELD, YFELD), Eintrittsimpuls (PXFELD, PYFELD) und Eintrittsenergie (EFELD) wurden in einem Startprogramm berechnet und in das Hauptprogramm eingelesen. Eintrittsenergie und Eintrittsimpuls wurden für alle Teilchen gleich gewählt. Die spezielle Einfallsebene ist durch das Verhältnis der x- und y-Komponenten des Impulses festgelegt.

4.5.3 Streueinheit

Hauptteil des Programms ist die "Streueinheit", die wiederholt durchlaufen wird. In ihr werden die Streuwinkel und der Energieverlust der Deuteronen berechnet. Ausserdem werden aus Position, Impuls und Energie der Deuteronen in der streuenden Atomlage Position, Impuls und Energie in der nächsten Atomlage berechnet.

Ein Deuteron mit dem Impuls $\vec{p}_0$ treffe an der Stelle $\vec{x}_0$ auf eine Atomlage in der Ebene $z_0 = 0$ (vgl. Abb. 14). Hier wird es in der Ebene, die durch $\vec{p}_0$ und $\vec{x}_0$ aufgespannt wird, um den Impuls $\Delta \vec{p}$ abgelenkt. Für kleine Streuwinkel ϑ (so dass $\tan \vartheta \sim \sin \vartheta \sim \vartheta$) und kleine Winkel α zwischen $\vec{p}_0$ und z-Achse ($|\sin \alpha| \ll 1$) ist $\Delta \vec{p}$ näherungsweise:

$$\Delta \vec{p} \sim |\Delta \vec{p}| \cdot \frac{\vec{x}_0}{|\vec{x}_0|} \sim \vartheta \cdot |\vec{p}_0| \cdot \frac{\vec{x}_0}{|\vec{x}_0|} \quad (4.5.1)$$

Der neue Impuls $\vec{p}_1$ des Deuterons ist dann:

$$\vec{p}_1 = \vec{p}_0 + \Delta \vec{p} = \vec{p}_0 + \vartheta \cdot |\vec{p}_0| \cdot \frac{\vec{x}_0}{|\vec{x}_0|} \quad (4.5.2)$$

Mit diesem Impuls erreicht das Deuteron die nächste Atomlage im Abstand d an der Stelle $\vec{x}_1$:

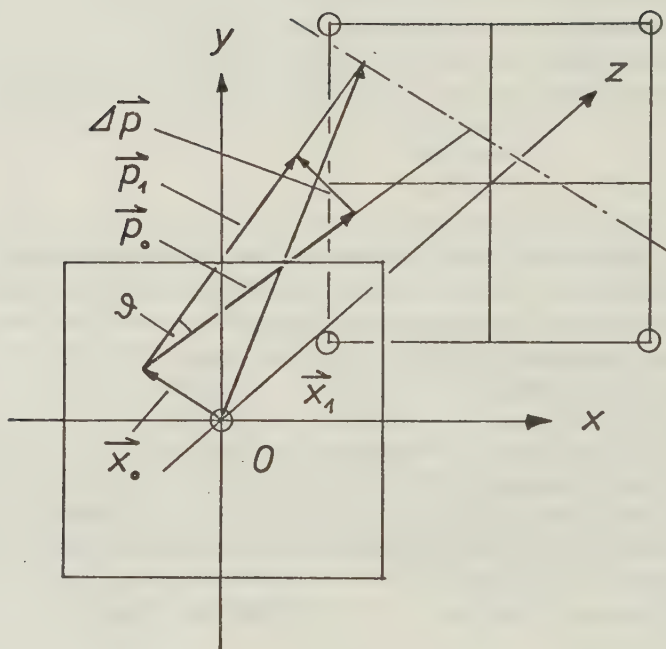


Abb. 14 Zur Impulsnäherung:
 Streuung an einem Niobatom (Kreise) bei O

$$\vec{x}_1 = \vec{x}_0 + \frac{d}{p_z^0} \cdot \vec{p}_1 = \vec{x}_0 + d \left(\frac{\vec{p}_0}{p_z^0} + \frac{|\vec{p}_0|}{p_z^0} \cdot \frac{\vec{x}_0}{|\vec{x}_0|} \cdot \mathcal{J} \right) \quad (4.5.3)$$

Für kleine α ($\cos \alpha \sim 1$) ist $p_z^0 \sim |\vec{p}_0| \sim |\vec{p}_1|$ und der Stossparameter $s \sim |\vec{x}_0|$. Benutzt man relative Impulse $p_{x \text{ rel}} = p_x / |\vec{p}|$ (PXREL) und $p_{y \text{ rel}} = p_y / |\vec{p}|$ (PYREL), so vereinfachen sich Gl. (4.5.2) und Gl. (4.5.3) zu:

$$\begin{aligned} p_{x \text{ rel}}^1 &= p_{x \text{ rel}}^0 + \mathcal{J} \cdot x_0 / s \\ p_{y \text{ rel}}^1 &= p_{y \text{ rel}}^0 + \mathcal{J} \cdot y_0 / s \end{aligned} \quad (4.5.2 \text{ a})$$

und:

$$\begin{aligned} x_1 &= x_0 + p_{x \text{ rel}}^1 \cdot d \\ y_1 &= y_0 + p_{y \text{ rel}}^1 \cdot d \end{aligned} \quad (4.5.3 \text{ a})$$

Mit einer thermischen Auslenkung $x_{\text{th}} = (x_{\text{th}}, y_{\text{th}}, z_{\text{th}})$ des streuenden Niobatoms aus der Ruhelage und einer Streuung an den Elektronen um einen Winkel $(\mathcal{J}_x, \mathcal{J}_y)$ erhält man statt Gl. (4.5.2a)

$$\begin{aligned} p_{x \text{ rel}}^1 &= p_{x \text{ rel}}^0 + \mathcal{J} (x_0 - x_{\text{th}}) / s + \mathcal{J}_x \\ p_{y \text{ rel}}^1 &= p_{y \text{ rel}}^0 + \mathcal{J} (y_0 - y_{\text{th}}) / s + \mathcal{J}_y \end{aligned} \quad (4.5.2 \text{ b})$$

mit $s = ((x_0 - x_{\text{th}})^2 + (y_0 - y_{\text{th}})^2)^{1/2}$. Gleichung (4.5.3 a) bleibt unverändert. Die Komponente z_{th} darf vernachlässigt werden, weil $z_{\text{th}} \ll d$; Kontrollrechnungen mit und ohne z_{th} bestätigen das.

In $\langle 111 \rangle$ erhält man statt Gl. (4.5.2.b)

$$p_{x \text{ rel}}^1 = p_{x \text{ rel}}^0 + \mathcal{V} \Delta x / s + \mathcal{V}_x + \gamma_1 \mathcal{V}_y$$

$$p_{y \text{ rel}}^1 = p_{y \text{ rel}}^0 + \mathcal{V} \Delta y / s + \gamma_2 \mathcal{V}_y \quad (4.5.2 \text{ c})$$

mit: $\Delta x = x_0 - x_{th} - \gamma_1 y_{th}$; $\Delta y = y_0 - \gamma_2 y_{th}$;

$$s = (\Delta x \cdot \Delta x + \Delta y \cdot \Delta y + \Delta x \cdot \Delta y)^{1/2}.$$

$\gamma_1 = -\sqrt{3}/3$ und $\gamma_2 = 2\sqrt{3}/3$ sind Metrikfaktoren des schiefwinkligen Koordinatensystems. Gleichung (4.5.3a) bleibt auch hier unverändert.

Die Amplituden x_{th} , y_{th} der thermischen Schwingungen der Gitteratome und die Streuwinkel $\mathcal{V}_x$, $\mathcal{V}_y$ bei der Streuung an den Elektronen werden mit normalverteilten Zufallszahlen (PNORM, Standardabweichung $\bar{x} = 1$) bestimmt, die dann entweder mit der mittleren Amplitude $\bar{x}_{th} = 0.0584 \text{ \AA}$ (bei thermischen Schwingungen) oder mit dem jeweiligen mittleren Streuwinkel $\mathcal{V}_x(E, s)$ (STREU, bei Streuung an den Elektronen) multipliziert werden. Zur Verkürzung der Rechenzeit wurden die normalverteilten Zufallszahlen nicht jedesmal neu berechnet, sondern aus Zahlenfeldern solcher Zahlen (THVIB, PNORM, je 2500 Zahlen) abgerufen. Diese Zahlen wurden noch statistisch gemischt und im Programm 400 Zahlen hintereinander abgelesen, wobei nur mehr der Anfangspunkt des Lesens durch einen Zufallszahlengenerator bestimmt wurde.

Der Streuwinkel $\mathcal{V}$ (Streuung an einem Niobatom) wurde nach Gl. (4.4.5) berechnet, der elektronische Energieverlust nach Gl. (4.4.12) und auf den Energieverlust pro Atom $\Delta E(\text{DELE})$ umgerechnet. Daraus wurde nach Gl. (4.4.16) der mittlere Streuwinkel pro Atom $\mathcal{V}_x = 1/2 \langle \mathcal{V}^2 \rangle^{1/2}$ (STREU) der Streuung an den Elektronen berechnet. Sowohl $\mathcal{V}$ als auch ΔE setzen sich aus einem stossparameterabhängigen Faktor (TA, SIL) und einem energieabhängigen Faktor ($1/E$, EP) zusammen (siehe Gl. (4.4.5) und Gl. (4.4.16)). Die energieabhängigen Terme werden

direkt in der Streueinheit berechnet, SIL, TA werden als Zahlenfelder eingegeben (je 400 Elemente). Parameter der Zahlenfelder war der Stossparameter im Bereich von $0.05 a_{TF} \leq s \leq 20 a_{TF}$ in Schritten von $\Delta s = 0.05 a_{TF}$ ($6.8 \cdot 10^{-3} \text{ \AA} \leq s \leq 2.7 \text{ \AA}$, $\Delta s = 6.8 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}$). Bei Stossparametern $s > 20 a_{TF}$ wurde $\psi = 0$ und ΔE gleich dem halben random-Energieverlust pro Atom gesetzt (siehe Abschnitt 4.4.3), bei Stossparametern $s < 0.05$ (Streuwinkel $> 20^\circ$, $\sim$ Gültigkeitsgrenze der Impulsnäherung) wurde die Berechnung der Teilchenbahn abgebrochen und das Teilchen als random betrachtet (Dechanneling). Dasselbe galt, wenn der Winkel zur z-Achse grösser als 20° war. Der Anteil solcher Deuteronen war selbst bei grossen Einschusswinkeln kleiner als 3 % der eingeschossenen Deuteronen.

Der Energieverlust $\Delta E(\text{DELE})$ pro Streuprozess wurde am Ende der Streueinheit von der Teilchenenergie subtrahiert. Bei Teilchenenergien kleiner als 50 keV wurde die Berechnung der Teilchenbahn abgebrochen und zur Berechnung der Trajektorie des nächsten Teilchens übergegangen. Im letzten Schritt der Streueinheit werden die Koordinaten des Teilchens in der nächsten Atomlage so transformiert, dass der Koordinatenursprung wieder in der Mitte der nächsten Streuzelle liegt.

4.5.4 Ausgabedaten

An Ausgabedaten wurden registriert:

- a) Die räumliche Verteilung $W(\vec{r})$ der Deuteronentrajektorien ($W(\text{IX}, \text{IY}, \text{J})$). Es wurde bei $\langle 001 \rangle$ im 20×20 Raster über jeweils 100, bei $\langle 111 \rangle$ im 24×24 Raster über jeweils 240 Atomlagen gemittelt, bei einigen Rechnungen zur feineren Auflösung über nur 10 bzw. 12 Atomlagen. Die Stützstellenweite in z-Richtung betrug 400 Atomlagen in $\langle 001 \rangle$ und 240 in $\langle 111 \rangle$, bei feinerer Auflösung 10 bzw. 12.

- b) Die mittlere Teilchenenergie $\bar{E}(\vec{r})$ ($WE(IX, IY, J)$) wurde im selben Raster und mit denselben Stützstellen registriert wie $W(\vec{r})$. Dabei wurden die Energien aller Deuteronen in einem Feldelement aufsummiert und die Summe durch die Zahl der Deuteronen in diesem Element, $W(\vec{r})$ dividiert (lineare Energiemittelung).
- c) Zusätzlich wurde die Anzahl der dechannelten Deuteronen und deren Energie und die Dechanneltiefe notiert.
- d) Das Programm musste aus Rechenzeit- und Speicherplatzgründen in mehrere (2 bis 5) Abschnitte (verschiedene Eindringtiefen) unterteilt werden. Dazu wurden auch die Austrittsdaten - Orts - ($XFELD, YFELD$) und Impulskoordinaten ($PFELD, PYFELD$) sowie die Energie ($EFELD$) - aller 400 bzw. 576 Deuteronen ausgegeben und mit diesen Daten der darauffolgende Abschnitt (nächstes Tiefenintervall) begonnen.

4.5.5. Kontrolle des Rechenprogramms

Das Rechenprogramm wurde (1) auf seine mathematische und physikalische Richtigkeit und (2) auf Programmierfehler hin überprüft.

- (1) In einem ersten Test wurden - unabhängig vom Programm - die Bahnen einiger Teilchen einige Atomlagen weit per Hand berechnet und mit den im Rechenprogramm ermittelten verglichen. Weiter wurde das Programm hinsichtlich des Energieverlustes der Deuteronen und der Streuung an den Niobatomen überprüft. Dazu wurden Deuteronen in einer random-Richtung (Winkel ψ gegenüber $[001]$: $\psi = 4^\circ$, $p_y : p_x = 2.35$) eingeschossen. Der mittlere Energieverlust der Deuteronen wurde mit dem random-Energieverlust und die Winkelaufstreuung des Strahles ("straggling") mit einem theoretisch ermittelten Wert verglichen. Ferner soll bei axialem Einschuss der Energieverlust von Ionen, mit Bahnen nahe der Kanalmitte, gleich dem halben random-Energieverlust sein (vgl. dazu Gl. 4.4.12 und Abb. 18).

- (2) Zur Überprüfung auf Programmierfehler erwies es sich als vorteilhaft, das Programm ohne thermische Schwingungen und ohne Streuung an den Elektronen laufen zu lassen. Die Ausgabedaten müssen dann genau die Gittersymmetrie besitzen. Es konnten so im einzelnen die Eingabedaten, die Symmetrie der Streuprozesse, die Verschiebung des Koordinatensystems von Atomlage zu Atomlage, sowie die Ausgabe der Daten geprüft werden. Weiter dient der Test der Überprüfung der verschiedenen Schleifen des Programms.

5 Ergebnisse der Modellrechnungen

5.1. Fluss- und Energieverteilung

Im folgenden sollen einige Eigenschaften der Fluss- und Energieverteilung der Deuteronen im Niobkristall dargestellt werden. Zur Erklärung einiger Details wird wiederholt der Begriff der Querergergie verwendet (Lindhard /32/). Er soll daher kurz erläutert werden.

Die Energie E eines Ions im Kristallpotential $U(x,y,z)$ ist: $E = M_1(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2)/2 + U(x,y,z)$. Es wird eine Energie E_{tr} in der x - y -Transversalebene zur Teilchenbewegung definiert: $E_{tr} = M_1(\dot{x}^2 + \dot{y}^2)/2 + U(x,y,z)$. Geführte Ionen bewegen sich in einem Bereich des Kristallpotentials, in dem dieses nahezu unabhängig von z ist. Sieht man weiter von thermischen Schwingungen der Gitteratome und einer Wechselwirkung mit den Kristallelektronen ab, durch die E und E_{tr} verändert werden können, so ist $E = \text{const.}$ und demzufolge E_{tr} eine Erhaltungsgrösse. Sie wird im folgenden, der Notation Lindhards folgend /32/, als Querergergie $E_{\perp}$ bezeichnet. Für kleine ψ (Winkel zwischen momentanem Teilchenimpuls und z -Achse) gilt:

$$E_{\perp} = E \psi^2 + U(x,y) \quad (5.1.1)$$

Bei Einschuss der Ionen in genauer Gitterrichtung ($\psi_0 = 0$) ist die Querergergie eines Ions allein durch seine Eintrittsstelle (x_0, y_0) ins Kristallpotential bestimmt: $E_{\perp}^0(0) = U(x_0, y_0)$. Gleichzeitig ist damit festgelegt, wie weit ein Ion gegen die Atomreihenpotentiale anlaufen kann. Bei schieferm Einschuss ($\psi_0 \neq 0$) erhalten die Ionen die Querergergie: $E_{\perp}^0(\psi_0) = E_0 \psi_0^2 + U(x_0, y_0) > E_{\perp}^0(0)$ und können daher näher an die Atomreihen heran als bei $\psi_0 = 0$.

5.1.1 Axialer Einschuss

Zur Darstellung der Fluss- und Energieverteilung eignen sich Konturenlinien konstanter Flussdichte ($W(z_0) = \text{const.}$) und konstanter mittlerer Energie ($\bar{E}(z_0) = \text{const.}$) in der x, y - Trans-

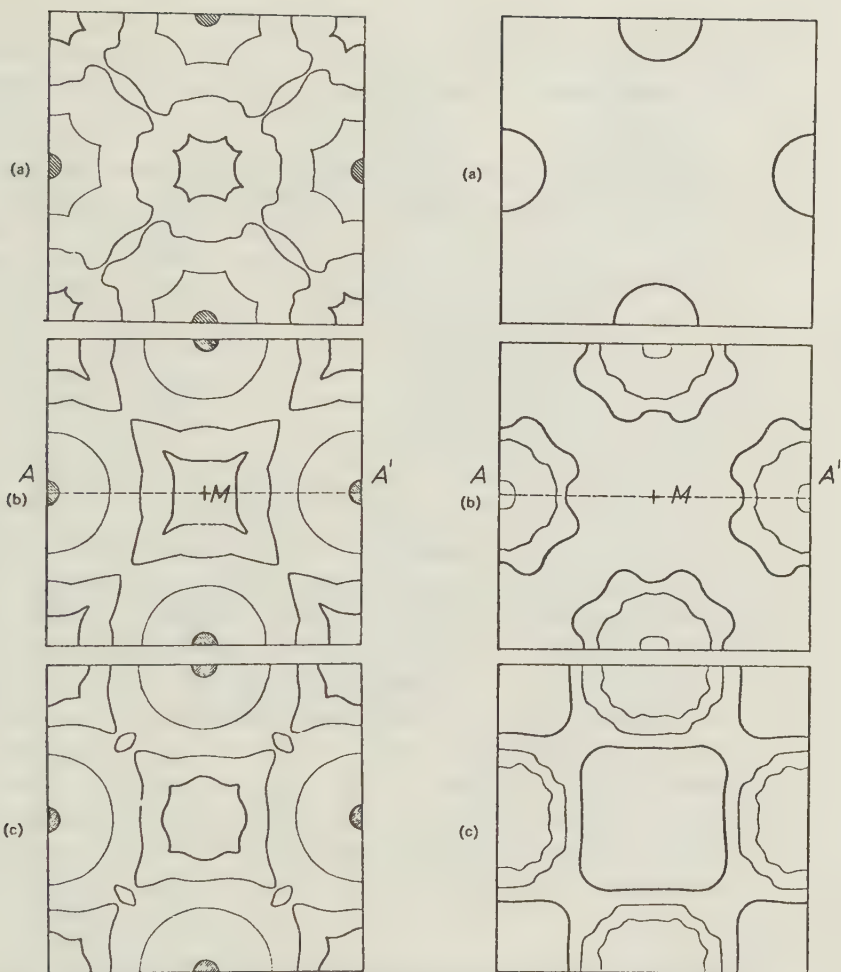


Abb. 15 Linien konstanter Flussdichte bzw. mittlerer kinetischer Energie (linke bzw. rechte Bilderreihe) von 300 keV Deuteronen in Niob für drei verschiedene Tiefen.
 ($\langle 001 \rangle$, $T = 150$ K, weitere Details siehe Text)

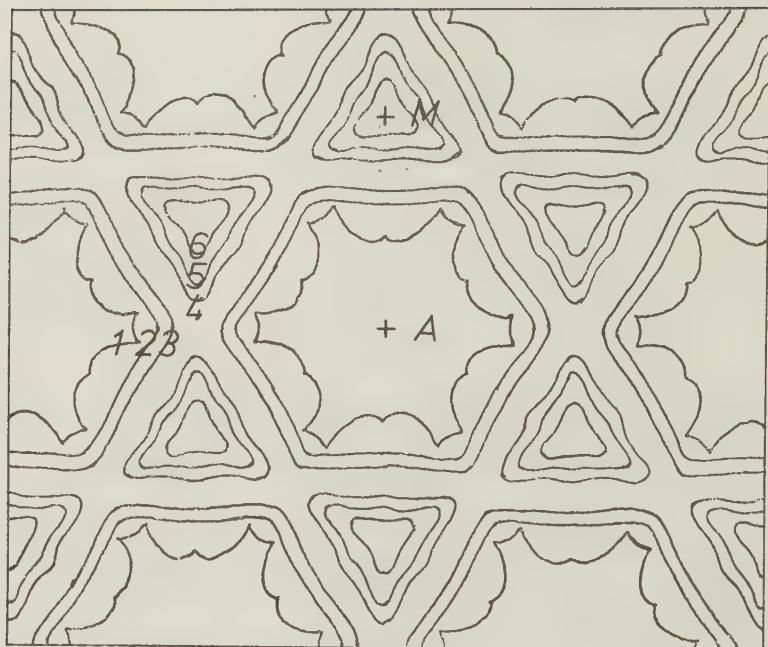


Abb. 16 Linien konstanter Flussdichte von 300 keV Deuteronen in Niob ($\langle 111 \rangle$, $T = 150$ K, Tiefe ~ 100 Å, weitere Details siehe Text)

versalebene. Abb. 15 zeigt im linken Teil Linien konstanten Deuteronenflusses in (001) bei Einschuss in [001] ($\psi = 0^\circ$). Die schraffierten Halbkreise deuten die Lage der Atomreihen an (Radius = a_{TF}).

Dargestellt sind die 20 %, 100 % und 250 % Konturenlinien (von dünnen zu dicken Linien) in Prozent einer Gleichverteilung. Die Tiefen z sind:

(a) $z = 450 \text{ a}$, (b) $z = 1250 \text{ a}$ und (c) $z = 2050 \text{ a}$

(Gitterkonstante $a = 3.29 \text{ \AA}$). Die Flussverteilung besitzt in dem besonderen Fall des senkrechten Einschusses [001] die Gittersymmetrie der (001) Ebene des Niobkristalles. In der Kanalmitte (M) ist der Deuteronenfluss deutlich erhöht (Fluxpeaking). Mit zunehmender Eindringtiefe z werden immer mehr Deuteronen von den Atomreihen weggedrängt.

Dieser Flussverteilung ist die Verteilung der mittleren Deuteronenenergie $\bar{E}(\vec{r}) = \int_0^{E_0} E \cdot W(E, \vec{r}) dE$ gegenübergestellt (Abb. 15, rechte Seite). Dargestellt sind Konturenlinien konstanter mittlerer Deuteronenenergie ($\bar{E}(z_0) = \text{const.}$). Die Tiefen entsprechen den Tiefen der linken Seite. Dargestellt sind die 97.5 %, 95 % und 92.5 % Konturenlinien (von dicken zu dünnen Linien) in % der jeweiligen Maximalenergie in der Kanalmitte (M). Die Abbildung zeigt deutlich den reduzierten Energieverlust achsennaher Ionen gegenüber Ionen, die in die Nähe der Atomreihen und damit in Bereiche höherer Elektronendichte gelangen können. Mit zunehmender Tiefe prägt sich der Unterschied immer stärker aus (s.a. Abb. 18).

Abb. 16 zeigt Konturenlinien konstanten Deuteronenflusses in $\langle 111 \rangle$ in einer Tiefe von $z \sim 35 \text{ a}$. Dargestellt sind die 25 % (1), 50 % (2), 75 % (3), 125 % (4), 200 % (5) und 300 % (6). Konturenlinien. Die Zentren dreizähliger Symmetrie sind die Kanalmitten M, die Zentren sechszähliger Symmetrie die Atomreihen A. Die Konturenlinien zeigen bis auf die andere Symmetrie der $\langle 111 \rangle$ -Richtung ähnliche Züge wie die Konturenlinien in $\langle 001 \rangle$ Richtung (Abb. 12).

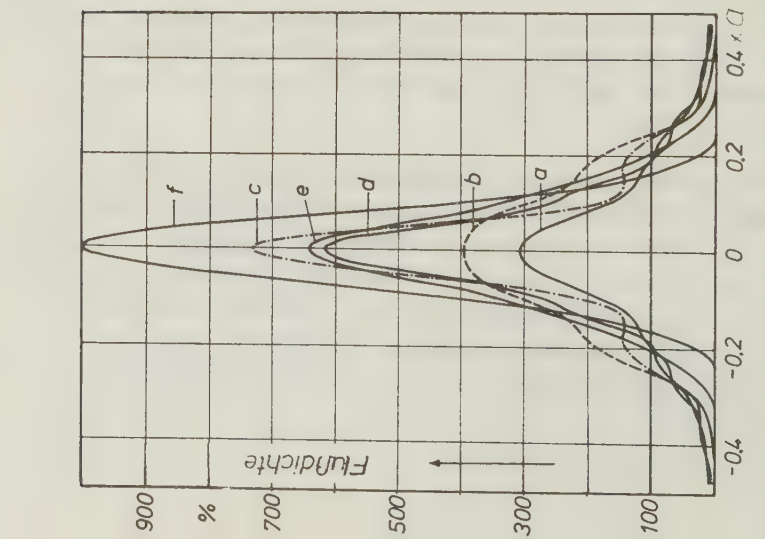


Abb. 17 Flussprofile in Abhängigkeit vom Abstand von der Kanalmitte für verschiedene Tiefen, 300 keV Deuteronen, $\langle 001 \rangle$, weitere Details siehe Text

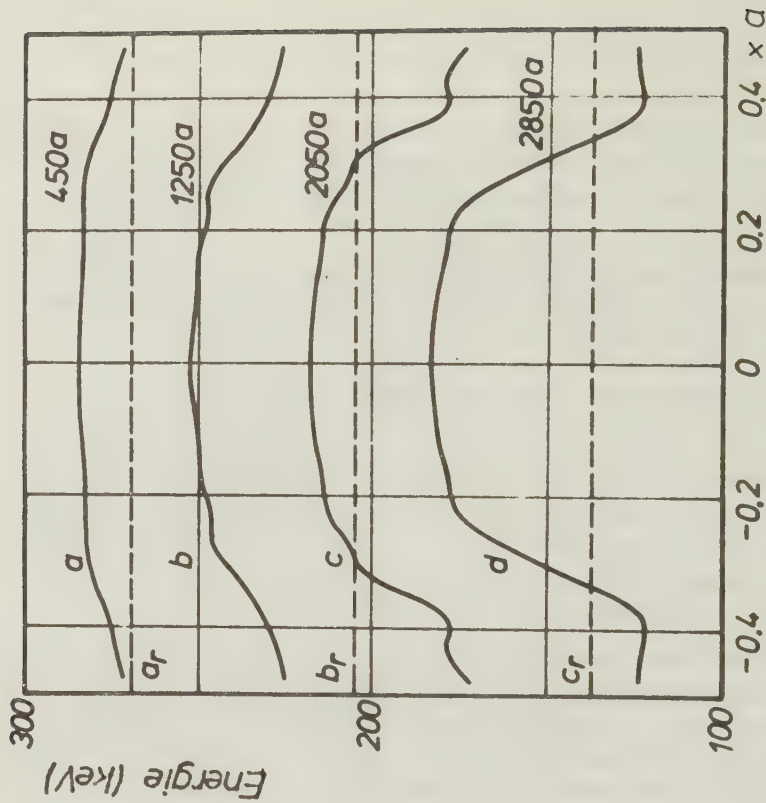


Abb. 18 Energieprofile in Abhängigkeit vom Abstand von der Kanalmitte für verschiedene Tiefen, $\langle 001 \rangle$, 300 keV Deuteronen

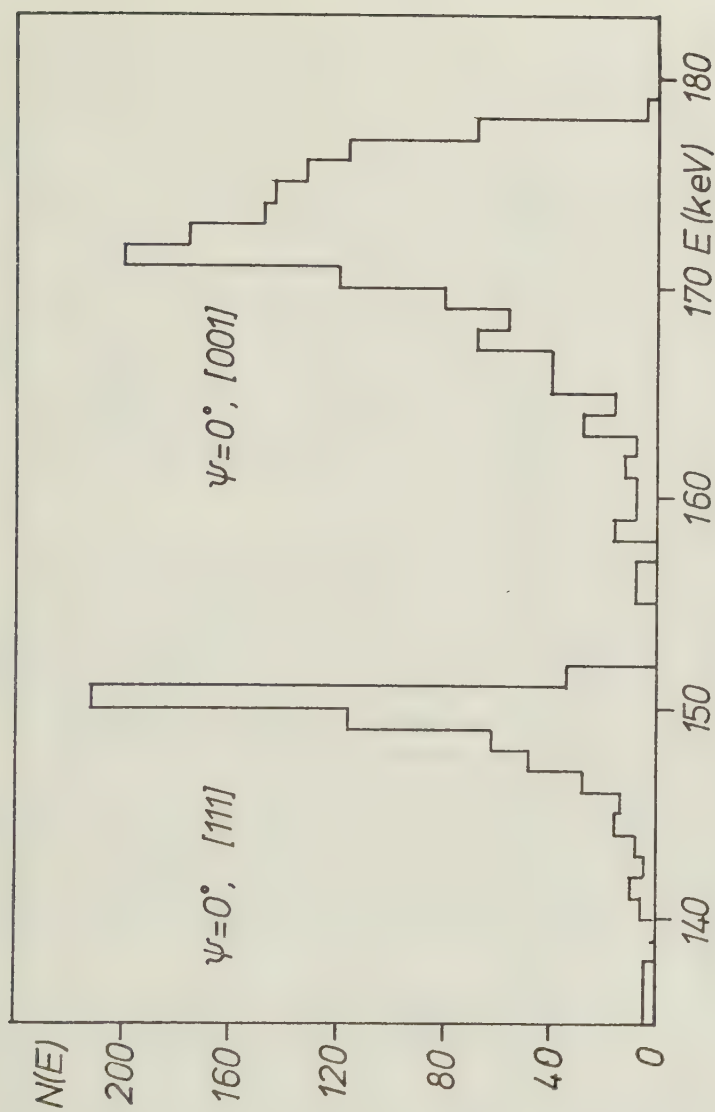


Abb. 19
 Energiespektren
 geführter Deuteronen
 in $\langle 001 \rangle$ und $\langle 111 \rangle$
 Tiefe ca. 10 000 Å

Abb. 17 zeigt die Flussprofile entlang der Linie AA' der Abb. 15. Die Tiefen sind (a) $z = 50$ a, (b) $z = 250$ a, (c) $z = 450$ a, (d) $z = 650$ a, (e) $z = 2850$ a und (f) $z = 5050$ a. Die Flusskonzentration nimmt in der Kanalmitte mit der Eindringtiefe zu, jedoch nicht monoton, sondern erreicht nach einigen Oszillationen einen stationären Wert von ca. 600 % (Kurve (d) und (e)) um gegen Ende der Reichweite weiter anzusteigen (Kurve (f)). Gleichzeitig wird der Ionenfluss mit zunehmender Tiefe aus der Umgebung der Atomreihen, die sich bei ± 0.5 a befinden, verdrängt. In einer Tiefe von $z = 5050$ a (Profil (f)) sind rd. 80 % des gesamten Ionenflusses auf ein Drittel der Transversalfläche konzentriert, während ein weites Drittel nahezu frei von Ionen ist. In der Kanalmitte sind auf 6 % der Gesamtfläche 40 % des Ionenflusses konzentriert.

Abb. 18 zeigt Profile der mittleren Deuteronenergie $\bar{E}(\vec{r})$ für verschiedene Tiefen z entlang der Linie AA' in Abb. 15, mit den Atomreihen bei ± 0.5 a. Die Abbildung zeigt, dass die Deuteronen, die nahe an die Atomreihen herankommen (hohe Querenergie) und dort Gebiete hoher Elektronendichte durchqueren, weit mehr Energie verlieren als Deuteronen, die sich bevorzugt in der Kanalmitte aufhalten (geringe Querenergie). Ein Vergleich von $\bar{E}(\vec{r})$ an der Stelle $x = 0, y = 0$ (Kanalmitte) mit der Restenergie von random - Deuteronen (gestrichelte Linien in Abb. 18), d.h. Deuteronen, welche die gleiche Strecke in einer polykristallinen Niobprobe durchlaufen haben, zeigt, dass letztere etwa doppelt soviel Energie verlieren wie Deuteronen in der Kanalmitte.

In Abb. 19 ist das Energiespektrum des Deuteronenstrahles $W(E, z_0) = \int_F W(E, z, \vec{\rho}) d\vec{\rho} / \int_F d\vec{\rho}$ in [001] in einer Tiefe $z = 3000$ a und in [111] in einer Tiefe $z \sim 2100$ a dargestellt ($\psi = 0^\circ$). Die Einschussenergie beträgt 300 keV. Die Energiespektren fallen - in Übereinstimmung mit dem Experiment - nach höheren Energien hin schneller ab als nach der niederenergetischen Seite. Bemerkenswert ist der Unterschied der Spektren in $\langle 001 \rangle$ und $\langle 111 \rangle$. Der steilere Abfall an der hochenergetischen Seite bei

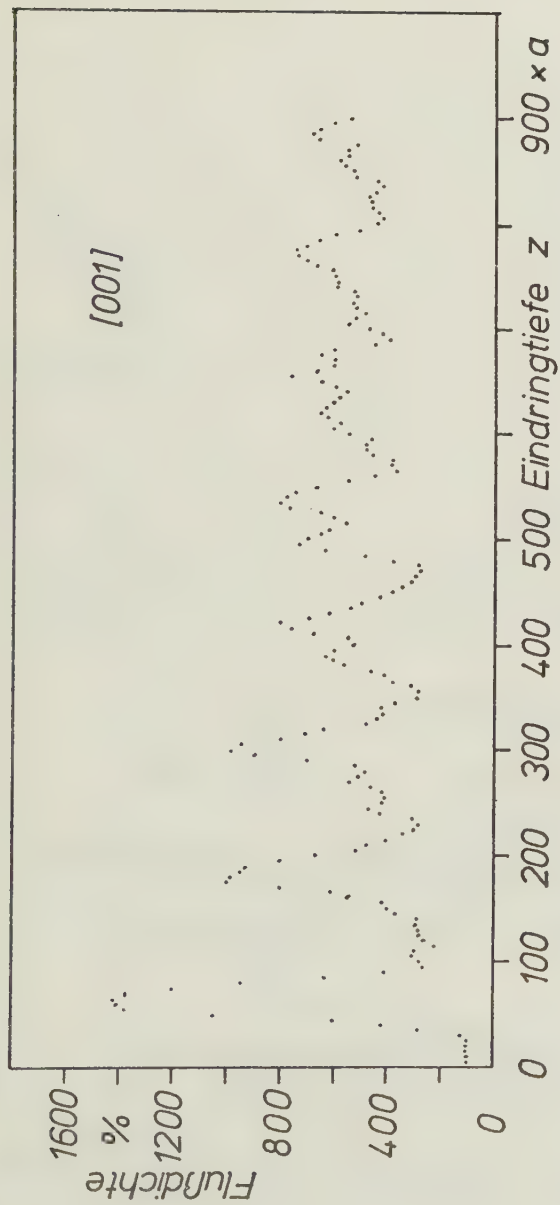


Abb. 20 Abhängigkeit der Flussdichte in der Kanalmitte von der Eindringtiefe z , pro Punkt Mittelung über 10 durchquerte Atomebenen, $\langle 001 \rangle$

$\langle 111 \rangle$ rührt daher, dass in $\langle 111 \rangle$ die wahrscheinlichste Querenergie wesentlich näher bei der minimalen Querenergie liegt als in $\langle 001 \rangle$.

In einer Reihe weiterer Rechnungen wurde die Abhängigkeit der Flussüberhöhung von der Eindringtiefe z bei Berücksichtigung verschiedener Einflüsse untersucht. Abb. 20 zeigt die Entwicklung des Deuteronenflusses in $\langle 001 \rangle$ in der Kanalmitte mit zunehmender Eindringtiefe z im Bereich nahe der Oberfläche ($0 \leq z \leq 900 \text{ a} \sim 3000 \text{ \AA}$). Der Ionenfluss wurde über jeweils 10 Atomlagen ($5 \text{ a} \sim 16.5 \text{ \AA}$) pro Stützstelle (Stützstellenabstand = $5a$) gemittelt. Der Ionenfluss steigt vom Gleichverteilungswert ($= 100 \%$) an der Oberfläche bis zu einem Maximalwert von 1200% bei $z = 65 \text{ a} (\sim 215 \text{ \AA})$ an, sinkt dann wieder ab, um in Oszillationen der Wellenlänge $\lambda \sim 120 \text{ a} (\sim 400 \text{ \AA})$ überzugehen. Ursache der Oszillationen sind die Pendelbewegungen der Deuteronen um die Kanalachse im Potential der umliegenden Atomreihen. Da alle Deuteronen von der Kristalloberfläche mit gleicher Phase starten, erhält man in den Kreuzungsbereichen der Deuteronenbahnen (vgl. dazu Abb. 21) Flussmaxima. Wegen der Anharmonizität des Kanalpotentials oszillieren Deuteronen mit grosser Querenergie mit kürzerer Wellenlänge als Deuteronen mit

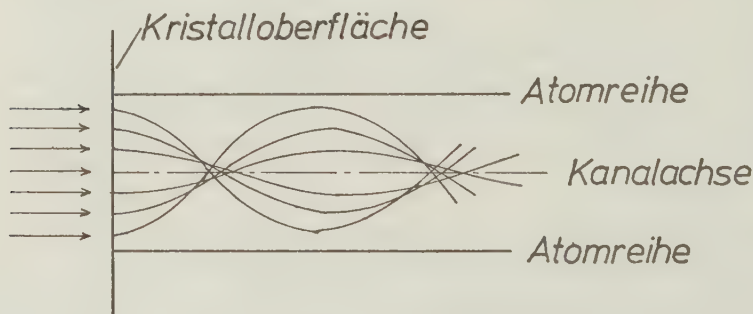


Abb. 21 Zur Entstehung der Flusssoszillationen:
Trajektorien geführter Teilchen

kleiner Querenergie ($=$ Dispersion, $\lambda(E_{\perp})$), was zum Auseinanderlaufen der Maxima mit zunehmender Tiefe führt.

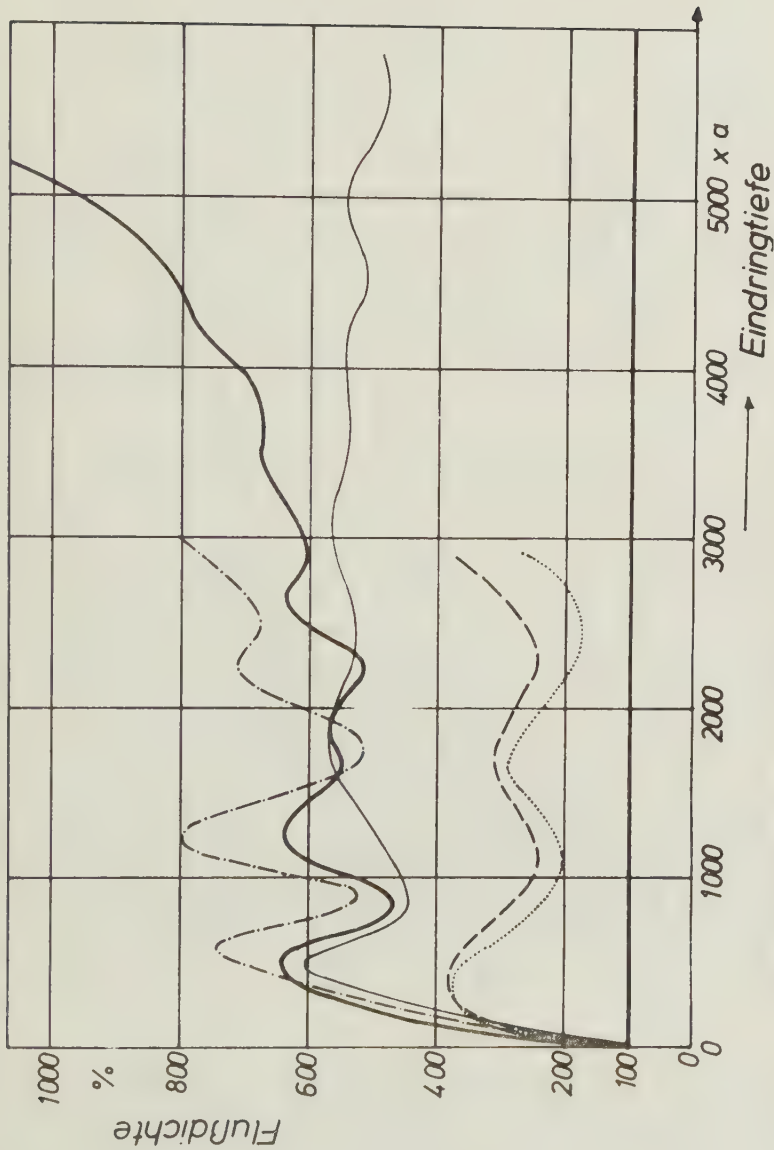


Abb. 22 Abhängigkeit der Flusddichte in der Kanalmitte von der Eindringtiefe in $\langle 001 \rangle$. Dicke Linie: vollständiges Programm. Dünne ausgezogene Linie: ohne Energieverlust. Strichpunktierte Linie: ohne Streuung an Elektronen. Gestrichelte Linie: Streuung an einer Elektronengleichverteilung. Punktierte Linie: Streuung an einer Elektronengleichverteilung und random-Energieverlust

In weiteren Rechnungen wurde die Abhängigkeit des Fluxpeaking vom Energieverlust und der Streuung an den Elektronen untersucht. In Abb. 22 ist der Deuteronenfluss in der Kanalmitte in $\langle 001 \rangle$ ($\psi = 0^\circ$) als Funktion der Eindringtiefe z dargestellt. Die dicke ausgezogene Linie zeigt den Verlauf, wenn thermische Gitterschwingungen, Energieverlust und Streuung an den Elektronen der Verteilung $\rho(\vec{r})$ berücksichtigt werden. Diese umfassende Rechnung ("Normalfall") wurde für die Flussdichte- und Energieverteilungen verwendet, mit denen die Protonenausbeute der $D(d,p)T$ -Reaktion (vgl. Gl. (4.1.6)) berechnet wurde. Dabei sind die kurzwelligen Oszillationen der Wellenlänge $\lambda = 120 \text{ \AA}$ (s. Abb. 20) durch Mittelung über 100 Gitterebenen ($50 \text{ \AA}$) geglättet worden. Der Deuteronenfluss steigt vom Gleichverteilungswert 100 % an der Kristalloberfläche bis ca. 600 % an, oszilliert dann um einen nahezu stationären Wert, um ab ca. 2500 $\text{\AA}$ bis zur vollen Reichweite weiter anzusteigen. Dieser zusätzliche Anstieg ist auf die Verringerung der Querergergie infolge des elektronischen Energieverlustes, den die Deuteronen erleiden, und die damit verbundene Konzentrierung der Deuteronen auf die Kanalmitte mit nur geringer Wechselwirkung mit Elektronen und Gitteratomen zurückzuführen. Das zeigt eine Berechnung der Deuteronenverteilung ohne Berücksichtigung des Energieverlustes (dünne ausgezogene Kurve). Lässt man die Streuung an Elektronen weg, so erhält man eine Verteilung (strichpunktierte Linie in Abb. 22), die im Wesentlichen der des Normalfalles (dicke Linie) entspricht, nur weniger gedämpft. Ersetzt man jedoch die ortsabhängige Elektronenverteilung durch eine Gleichverteilung der Elektronen im Kristall (gestrichelte Kurve) so wird die Flussüberhöhung auf rund die Hälfte reduziert. Ersetzt man zudem den ortsabhängigen Energieverlust durch den random-Energieverlust, so nimmt die Flussüberhöhung weiter ab (punktierte Linie).

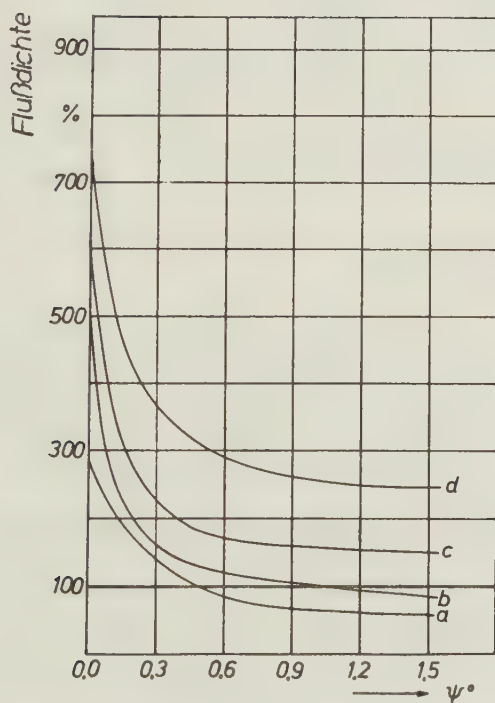


Abb. 23 Abhängigkeit der Flussdichte in der Kanalmitte vom Einschusswinkel ψ gegenüber $\langle 001 \rangle$ für die Tiefen a) 50 a b) 1450 a c) 2850 a d) 4250 a. 300 keV Deuteronen in Niob. Gitterkonstante $a = 3.3 \text{ \AA}$

5.1.2 Schiefer Einschuss

In weiteren Rechnungen wurde die Abhängigkeit der Flussverteilung vom Einschusswinkel untersucht. Abb. 23 zeigt die Abhängigkeit des Flusses in der Kanalmitte vom Einschusswinkel gegenüber [001] in der Drehebene (130). Die Tiefen sind: (a) 50 a, (b) 1450 a, (c) 2850 a und (d) 4250 a. Der Fluss in Kanalmitte weist ein scharfes Maximum bei $\psi = 0^\circ$ auf mit einer halben Halbwertsbreite von ca. 0.3° (zum Vergleich: Lindhardwinkel $\psi_1 = 1.9^\circ$). Diese geringe Halbwertsbreite erfordert bei experimenteller Nutzung der Flussüberhöhung eine Strahldivergenz von höchstens $\pm 0.1^\circ$. Bei geringen Eindringtiefen sinkt die Flussdichte unter den Gleichverteilungswert von 100 % ab, was auf Ebenenchannelling in der - allerdings dafür ungünstigen- (130) Ebene zurückzuführen ist.

5.2. Flussverteilung an den diskutierten Zwischengitterpositionen von Deuterium in Niob

Im folgenden soll die Aenderung des Deuteronenflusses mit dem Einschusswinkel ψ an den Tetraeder-, Oktaeder- und Hexaederpositionen für Deuterium in Niob skizziert werden. Die Flussprofile der Abb. 25 beziehen sich auf eine Eindringtiefe z und gelten für die Punkte der angegebenen Gitterpositionen.

Abb. 24 zeigt die Projektion des Niobgitters (grosse Kreise) mit den verschiedenen Zwischengitterpositionen (kleine Kreise) auf die (001)-Transversalebene zu [001] (Abb. 24 a) und auf die (111) Transversalebene zu [111] (Abb. 24 b). Abb. 25 zeigt die Aenderung des Deuteronenflusses an diesen Positionen mit dem Einfallswinkel ψ des Deuteronenstrahles, (a) in $\langle 001 \rangle$, Tiefe 3000 Å, (b) in $\langle 111 \rangle$, Tiefe 2000 Å.

5.2.1 $\langle 001 \rangle$ Richtung

In $\langle 001 \rangle$ gibt es relativ zur Kanalachse und zur (130) Einschussebene (strichpunktierte Linie in Abb. 24a) drei verschiedene Positionen bei Tetraederlage. Position 1 in Kanalmitte

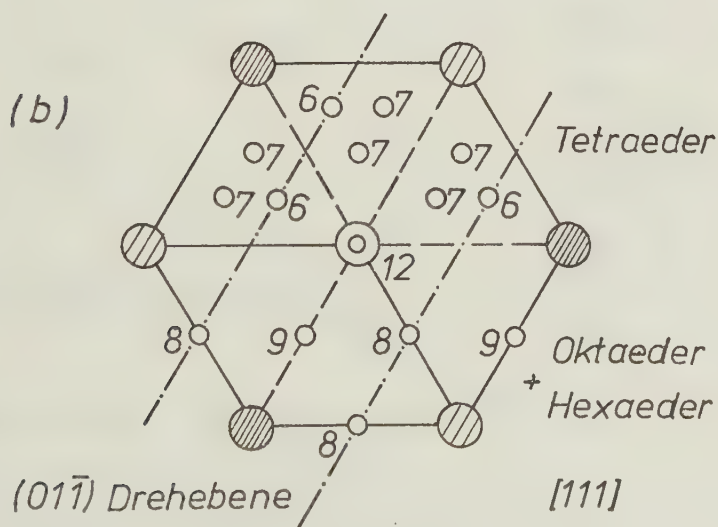
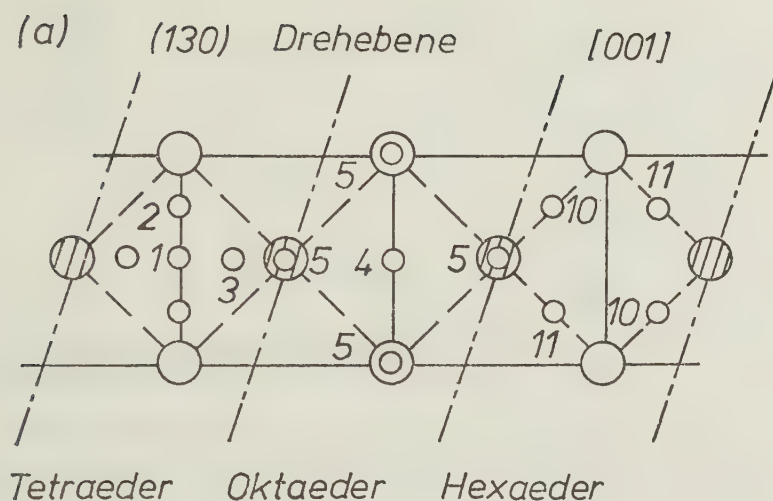


Abb. 24 Projektion der verschiedenen Zwischengitterpositionen auf a) eine (001) , b) eine (111) Ebene. Die strichpunkttierten Linien deuten die Lage der Einschussebenen an.

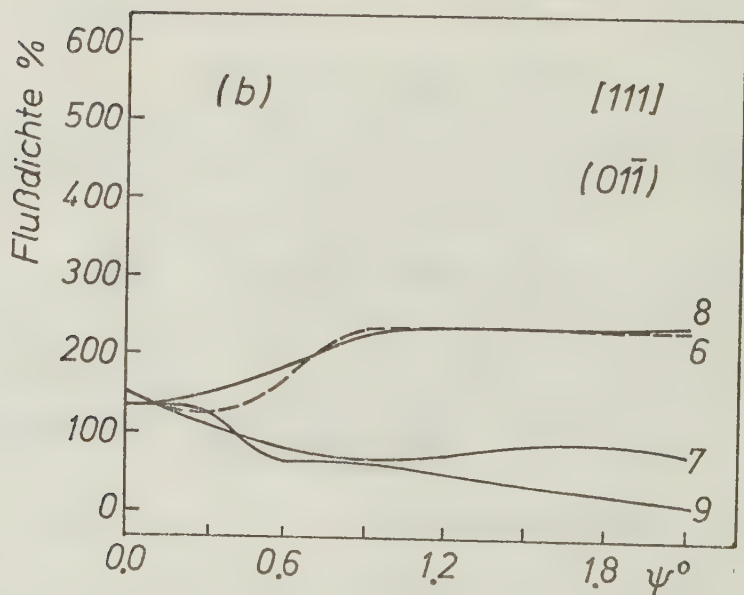
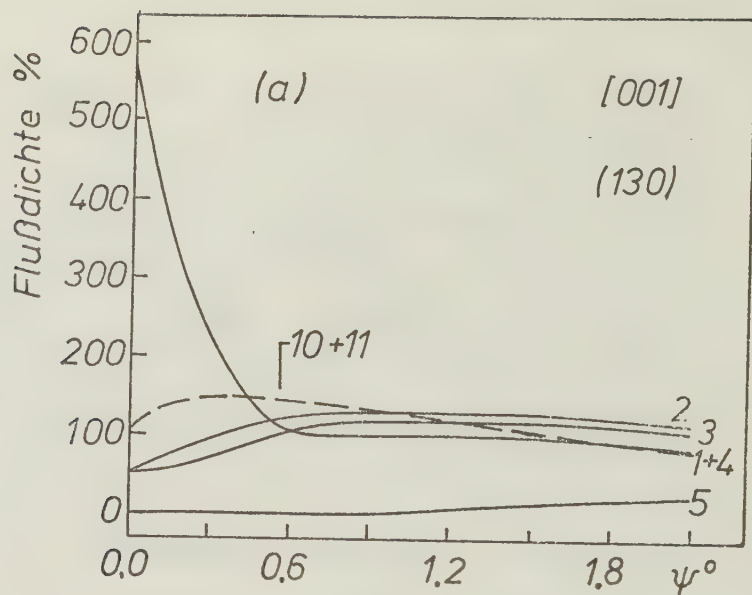


Abb. 25 Abhängigkeit der Deuteronenflussdichte an den Positionen der Abb. 24 vom Einschusswinkel ψ

mit dem Gewicht 2 (2 Positionen übereinander), Position 2 und 3 mehr am Rand des Kanales jeweils mit dem Gewicht 2 (beide treten zweifach auf). In Position 1 sinkt der Fluss von einem Wert von ca. 550 % bei $\psi = 0^\circ$ (axiales Channeling) ab auf etwa den Gleichverteilungswert (100 %) bei $\psi \sim 0.6^\circ$. Der Flussverlauf in Position 2 ist in etwa identisch mit dem in Position 3; er steigt von 50 % auf knappe 150 % bei $\psi \sim 0.9^\circ$ an. Insgesamt (mit der angegebenen Wichtung) ergibt sich für Tetraederpositionen ein schwaches Maximum bei $\psi = 0^\circ$ über einem relativ hohen Untergrund. Man vergleiche damit die Ausbeutekurve für Tetraederpositionen (Abb. 26a), die man bei vollständiger Auswertung erhält.

In Oktaederlage gibt es in $\langle 001 \rangle$ 2 verschiedene Positionen (Abb. 24 a). Position 4 (identisch mit Position 1) in der Kanalmitte und dem Gewicht 2 und Position 5, die innerhalb der Atomreihen liegt, mit dem Gewicht 4 (sie kommt 4 mal vor). In Position 5 steigt der Fluss von ~ 0 % bei $\psi = 0^\circ$ auf etwa 25 % bei $\psi = 1.8^\circ$ an. Insgesamt ergibt sich für Oktaederpositionen ein stark ausgeprägtes Maximum über einem relativ niedrigen Untergrund.

In Hexaederlage gibt es in $\langle 001 \rangle$ (Abb. 24 a) ebenfalls zwei verschiedene Positionen. Position 10 und 11, beide an den Sattelpunkten zwischen den Atomreihenpotentialen und mit gleichem Gewicht. Der Flussverlauf an diesen Positionen ist nahezu identisch und steigt vom Gleichverteilungswert (100 %) bei $\psi = 0^\circ$ leicht an und fällt dann wieder auf diesen Wert zurück bei $\psi = 1.8^\circ$. Man erwartet demnach ein schwaches Minimum bei $\psi = 0^\circ$.

5.2.2 $\langle 111 \rangle$ -Richtung

In $\langle 111 \rangle$ gibt es (Abb. 24 b) in Tetraederlage relativ zu den Atomreihen und zur $(01\bar{1})$ Drehebene (strichpunktierte Linie in Abb. 24 b) 2 verschiedene Positionen. Alle Positionen besitzen den gleichen Abstand von den Atomreihen und liegen nahe der Kanalmitte. Jedoch liegt Position 6 (Gewicht 1) in der Mittel-

ebene zwischen den $(01\bar{1})$ Atomebenen, während Position 7 (Gewicht 2, kommt zweimal vor) auf halbem Weg zwischen dieser Mittelebene und einer Atomebene liegt. Bei $\psi = 0^\circ$ ist der Fluss in beiden Positionen gleich und beträgt etwa 150 % (axiales Channeling), steigt für $\psi \neq 0$ in Position 6 nach Durchlaufen eines Minimums bei etwa 0.3° auf 250 % an (planares channeling in der $(01\bar{1})$ Ebene). In Position 7 sinkt der Fluss auf einen Wert knapp unterhalb des Gleichverteilungswertes. In diesem Fall kann das Ergebnis nicht direkt mit Abb. 26 b verglichen werden, da hier offensichtlich auch Beiträge aus anderen Tiefen z berücksichtigt werden müssen.

Oktaeder- und Hexaederpositionen sind in $\langle 111 \rangle$ bis auf Pos. 12 (Hexaederposition), die aber zur Protonenausbeute nicht beiträgt, identisch (Abb. 24 b). Es gibt zwei Positionstypen, die auf den Sattelpunkten zwischen den Atomreihenpotentialen liegen und die bei axialem Einschuss ($\psi = 0^\circ$) gleichberechtigt sind. Bei Winkeln $\psi \neq 0$ liegen die Positionen 8 (Gewicht 2) genau in der Mittelebene zwischen zwei $(01\bar{1})$ Atomebenen, während Position 9 (Gewicht 1) genau in diesen liegt. Bei $\psi = 0^\circ$ ist der Fluss in allen Positionen gleich (~ 130 %, axiales channeling) und steigt in Position 8 auf 250 % an (planares Channeling, hier identisch mit Position 6), während er in Position 9 auf nahezu 0 % absinkt. Man erwartet danach (mit der angegebenen Wichtung) ein schwaches Minimum bei $\psi = 0^\circ$.

Die Ergebnisse, die man bei vollständiger Auswertung erhält, sind im nächsten Abschnitt dargestellt.

5.3 Berechnung der Gesamtausbeute an Protonen

Die Protonenausbeute nach Gl. (4.1.6) wird für verschiedene vorgegebene Verteilungen $f(\vec{r})$ berechnet. Anschliessend werden die errechneten Ausbeuteprofile mit den gemessenen Ausbeuten verglichen. Die zur Berechnung benötigten Verteilungen $W(\vec{r})$ und $\bar{E}(\vec{r})$ liegen infolge der Rastereinteilung der x, y - Ebene und der endlich vielen Stützstellen in z -Richtung als Zahlenfelder vor

(vgl. Abschnitt 4.5.4). Daher wurde auch die Deuteriumverteilung $f(\vec{r})$ bzw. ihre Projektion $g(\vec{q})$ auf die Transversalebene im selben Raster berechnet. Normiert man $W(\vec{r})$ und $f(\vec{r})$ so, dass $\int W(\vec{r}) d\vec{r} = V$ und $\int f(\vec{r}) d\vec{r} = C \cdot V$ (C = Deuteriumgehalt, V = durchstrahltes Volumen), und ersetzt man die Integration über $\vec{r}$ in Gl. (4.1.6) durch eine Summation, so erhält man als Protonenausbeute:

$$Y(E_0, \Psi_{<uvw>}) = N_D N \alpha_0 \Delta V / a^2 \sum_i \{ W(\vec{r}_i) \mathcal{G}(\vec{E}(\vec{r}_i), \vec{q}) f(\vec{r}_i) \} \quad (5.3.1)$$

Hierbei ist N_D die Gesamtzahl der eingeschossenen Deuteronen, N die Anzahl der Niobatome pro cm^3 und $\Delta V = \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ das Volumen eines Rasterelements. Die Summation über i erstreckt sich über alle Rasterpunkte (x_i, y_i) innerhalb der Oberfläche a^2 der Elementarzelle und alle Stützstellen z_i bis zu einer effektiven Reichweite z_0 , die einer Restenergie der Deuteronen von 50 keV entspricht. Der Beitrag, den der Rest der Reichweite zur gesamten Protonenausbeute liefert, liegt bei etwa 2 % und wurde vernachlässigt. Die nach dieser Gleichung berechnete Protonenausbeute, ist in Abb. 26 für einen Deuteriumgehalt von 1 Atom % als Funktion des Einschusswinkels Ψ der Deuteronen dargestellt.

Abb. 26a zeigt die berechneten Profile in $\langle 001 \rangle$. Die Profile für Oktaeder- und Tetraederplätze sind einander ähnlich. Beide zeigen über einem Untergrund ein Maximum bei $\Psi = 0^\circ$, jedoch von unterschiedlicher Höhe und Breite. So schliessen die Maxima denn auch verschiedene Flächen ein, die sich annähernd wie 7 : 2 verhalten. Die Schwierigkeit, wieviel vom Untergrund noch zur Fläche des Maximums hinzugezählt werden soll, wurde dabei umgangen, indem die Flächenstücke oberhalb der Verbindungslinie Wendepunkt-Wendepunkt miteinander verglichen wurden. Bei reinen Gaußkurven haben diese die Eigenschaft, dass sie invariant gegenüber einer Faltung mit normierten Gaußkurven beliebiger Standardabweichung bleiben. Das Profil für Hexaederplätze weist bei $\Psi = 0^\circ$ ein Minimum auf und unterscheidet sich damit deutlich von den anderen Profilen.

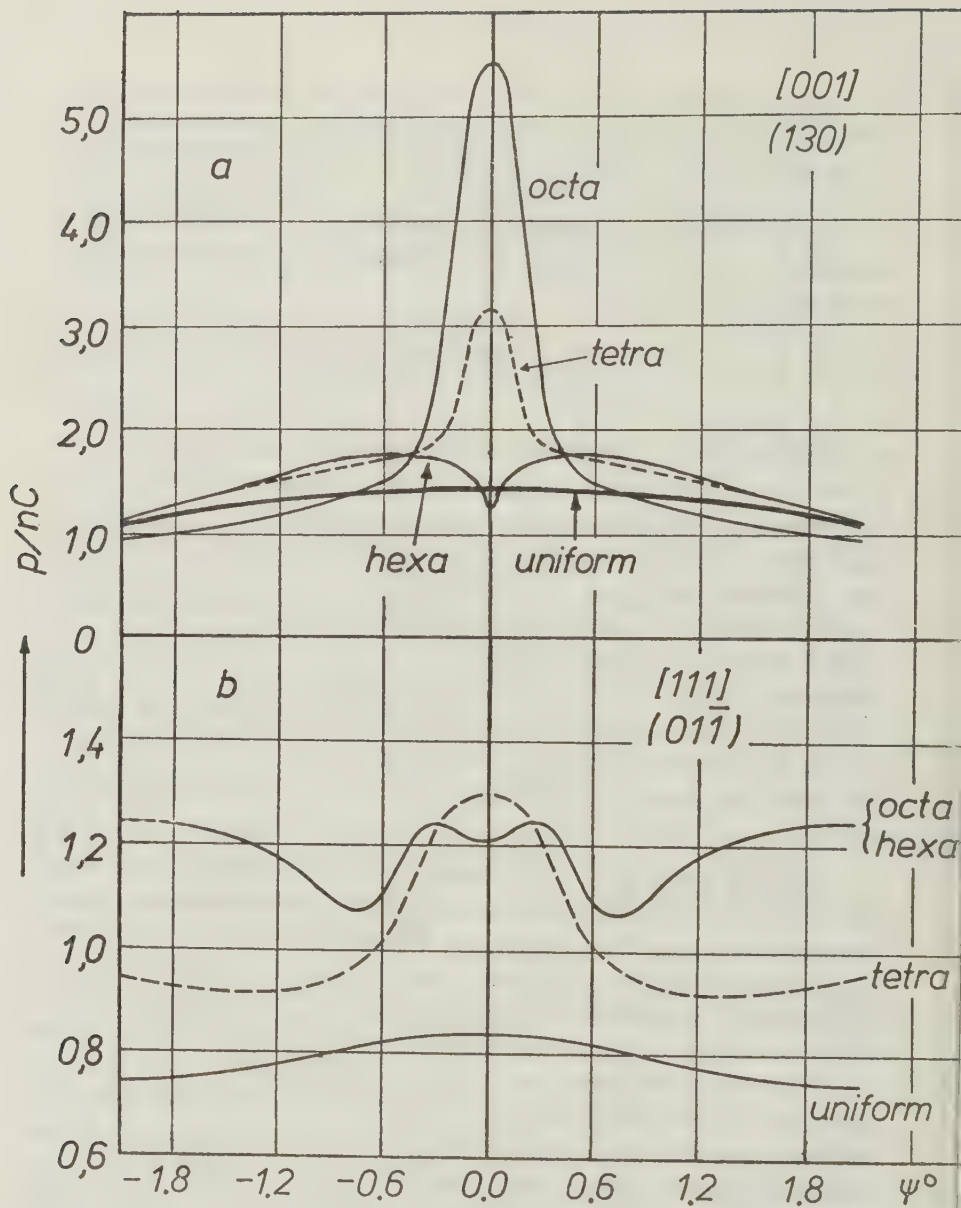


Abb. 26 Berechnete Protonenausbeute in Abhängigkeit vom Einschusswinkel ψ , a) $\langle 001 \rangle$, b) $\langle 111 \rangle$

Abb. 26 b zeigt die berechneten Profile in $\langle 111 \rangle$. Die Profile für Oktaeder- und Hexaederpositionen sind identisch, da auch die Deuteriumverteilungen in dieser Richtung gleich aussehen (vgl. Abb. 24 b). Überraschend ist die Ausbildung des kleinen Doppelmaximums um $\psi = 0^\circ$. Man würde nach dem Lindhardschen Modell (vgl. /32/) und analog zu $\langle 001 \rangle$ (vgl. Profil für Hexaederpositionen) ein Minimum bei $\psi = 0^\circ$ erwarten und anschliessend einen monotonen Anstieg zu grösseren Winkeln hin. Die Erklärung für das Doppelmaximum bietet Abb. 25 b. Der Fluss in Position 8 und 9 ist bei $\psi = 0^\circ$ gleich und wegen des (im Vergleich zur Kanalmitte) nur wenig höheren Potentials an diesen Sattelpunkten relativ hoch ($\sim 130\%$). Bei kleinen Winkeln ($\psi \lesssim 0.3^\circ$) steigt der Fluss in Position 8 infolge planaren Channelings an, während er in Position 9 nahezu unverändert bleibt ($\rightarrow$ Doppelmaximum). Bei noch grösseren Winkeln ($\psi \gtrsim 0.3^\circ$) sinkt dann der Fluss in Position 9 mehr als doppelt so schnell wie er in Position 8 steigt, was - bei Berücksichtigung der richtigen Wichtung - zum Absinken der Protonenausbeute bei ca. 0.6° führt. Bei Winkeln $\psi \gtrsim 0.9^\circ$ überwiegt dann der Flussanstieg in Position 8, so dass es zum Wiederanstieg der Protonenausbeute kommt.

Das Profil für Tetraederpositionen weist ein ausgeprägtes Maximum bei $\psi = 0^\circ$ über einem relativ niedrigen Untergrund auf und unterscheidet sich damit deutlich vom Profil für Oktaeder- und Hexaederpositionen.

Zum Vergleich sind noch Profile für eine Gleichverteilung des gelösten Deuteriums über die Elementarzelle eingetragen. Beide weisen ein schwaches Maximum bei $\psi = 0^\circ$ auf. Dieses Maximum ist zurückzuführen auf den geringeren Energieverlust, den geführte Ionen bei axialem Einschuss erleiden, und zeigt, dass der Einfluss der Energieverteilung $\bar{E}(\vec{r})$ auf die Ausbeuteprofile relativ gering ist.

6 Vergleich der berechneten Profile mit den Messkurven

In diesem Abschnitt sollen die Profile aus den Modellrechnungen (s. letzter Abschnitt; sie werden im folgenden als theoretische Profile bezeichnet), mit den experimentellen Kurven verglichen werden. Dazu bedürfen sowohl die theoretischen Kurven einer Anpassung an die Parameter des Experimentes, so an die effektive Deuteriumkonzentration im Niobkristall sowie an die experimentelle Strahldivergenz, als auch die gemessenen Kurven einer Korrektur hinsichtlich der ansteigenden Deuteriumkonzentration.

6.1 Korrekturen

6.1.1 Experimentelle Profile

Abb. 27 zeigt die gemessenen Protonenausbeuteprofile in unkorrigierter Form. In $\langle 001 \rangle$ (Abb. 27 a) beträgt die Schrittweite in der (130) Drehebene 0.09° , die Deuteronenzahl pro Messpunkt entspricht einer Ladungsmenge von $1 \mu\text{C}$. In $\langle 111 \rangle$ (Abb. 27 b) beträgt die Schrittweite in der $(01\bar{1})$ Drehebene 0.4° , die Ladungsmenge pro Messpunkt ebenfalls $1 \mu\text{C}$. Wegen der geringen Gesamtladungsmenge in $\langle 111 \rangle$ (insgesamt $17 \mu\text{C}$) braucht das Profil in dieser Richtung nicht korrigiert zu werden und kann direkt mit den theoretischen Profilen verglichen werden. Infolge der kleinen Schrittweite in $\langle 001 \rangle$ - sie wurde gewählt, weil in dieser Richtung eine Feinstruktur des Profils vermutet wurde (vgl. /8/) - beträgt hier die Gesamtladungsmenge $72 \mu\text{C}$, was zu einer erheblichen Erhöhung der Deuteriumkonzentration im Oberflächenbereich des Kristalls führt. Deshalb muss die Protonenausbeute in dieser Richtung, insbesondere bei Winkeln $\psi > 0$ auf eine konstante Deuteriumkonzentration korrigiert werden (vgl. dazu auch Abschnitt 3.3). Die korrigierte Kurve ist ebenfalls in Abb. 27 a eingetragen.

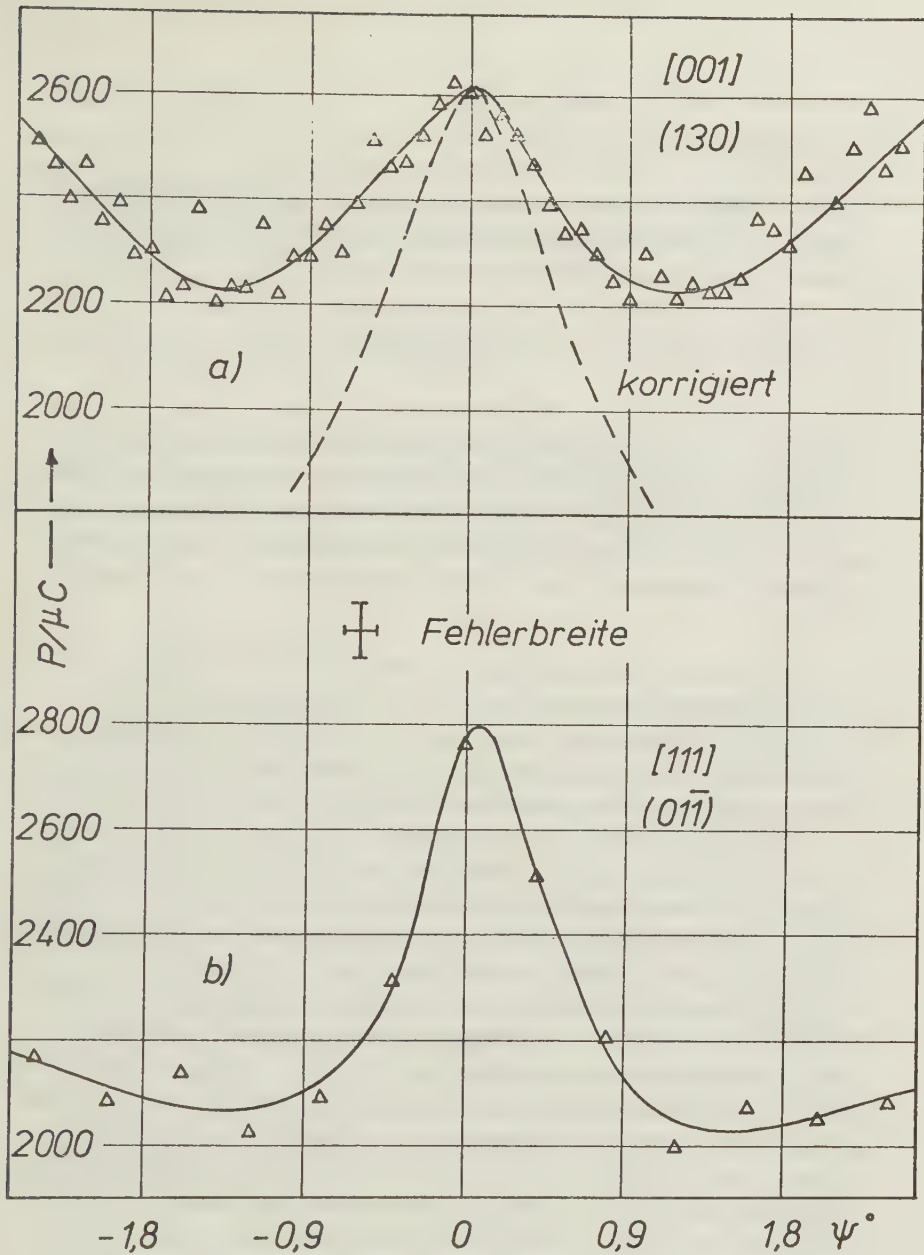


Abb. 27 Gemessene Protonenausbeute in Abhängigkeit vom Einschusswinkel ψ , a) $\langle 001 \rangle$, b) $\langle 111 \rangle$.
 --- korrigierte Kurve

6.1.2 Theoretische Profile

Die effektive Deuteriumkonzentration C_{eff} des Experiments wurde aus der Protonenausbeute bei Deuteroneneinfall in random-Richtung ermittelt gemäss der Beziehung:

$$Y_r(E_0) = N_D N C_{\text{eff}} \Omega_0 \int_{E_0} \epsilon_r^{-1}(E) \sigma(E, \bar{\psi}) dE \quad (6.1.1)$$

Dabei ist ϵ_r der Energieverlust von Deuteronen in einer polykristallinen Niobprobe (vgl. Abschnitt 4.4.3), N_D die Zahl der eingeschossenen Deuteronen und N die Zahl der Niobatome pro cm^3 . Die theoretischen Profile, für eine Konzentration von 1 Atom % berechnet, wurden mit dem so ermittelten Faktor $C_{\text{eff}} \cdot 100$ multipliziert.

Weiter wurden diese Profile (sowohl in $\langle 001 \rangle$ als auch in $\langle 111 \rangle$) mit einer Gaußkurve der Standardabweichung $\Delta\psi = 0.4^\circ$ gefaltet. Der verwendete Wert von 0.4° wurde durch Anpassung des theoretischen Profils in $\langle 001 \rangle$ an die experimentelle Kurve ermittelt. Diese Faltung berücksichtigt summarisch den Einfluss der experimentellen Strahldivergenz (0.1°), einer Mosaikstruktur des Kristalles (0.11° , vgl. Abschnitt 3), des Goniometerspiels (0.1°) und einer Aufstreuung des Strahls durch die Oberflächenoxidschicht (ca. $30 \text{ \AA}$). Die Aufstreuung des Strahls durch die Oxydschicht beträgt je nach Niobgehalt zwischen 0.3° ($\text{Nb}_{0.5}\text{O}_5$) und 0.5° (Nb_2O_5). Die totale Aufstreuung (es addieren sich die Quadrate der Winkel) liegt zwischen 0.35° und 0.52° , was gut zum verwendeten Wert von 0.4° passt. Allgemein glättet eine solche Faltung den Kurvenverlauf, so z.B. das Doppelmaximum in $\langle 111 \rangle$ für Oktaeder- und Hexaederpositionen. Ausser einer Faltung in der Einschussebene ist eine weitere Faltung senkrecht zu ihr nötig, da die effektive Strahldivergenz nicht auf die Einfallsebene beschränkt ist. Fällt die Einfallsebene nicht mit einer niedrigindizierten Kristallebene zusammen, so weicht - in der Umgebung eines Winkels ψ_0 - die Flussverteilung innerhalb der Drehebene nicht zu sehr von der senk-

recht zur Drehebene ab. Die zweite Faltung ist damit schon in der ersten mitberücksichtigt. Das trifft bei einer niedrigindizierten Einfallsebene (wie z.B. der $(01\bar{1})$ Ebene) nur z.T. zu, jedoch ist die Halbwertsbreite von 0.4° klein gegenüber dem Winkelgesamtbereich. Daher ändert eine solche Faltung die Gesamtform der Profile nur wenig.

6.2 Vergleich der theoretischen Profile mit den experimentellen Profilen

In Abb.28 werden die theoretischen Profile für die verschiedenen Zwischengitterpositionen mit den experimentellen Kurven verglichen. Die einzelnen Messpunkte sind durch Rechtecke markiert, deren Seitenlänge der Fehlerbreite der Einzelmessungen entspricht.

6.2.1 $\langle 001 \rangle$ Richtung

Beim Vergleich kann man in $\langle 001 \rangle$ wegen der grundlegend verschiedenen Profilform Hexaederplätze sofort ausschliessen. Eine Entscheidung zwischen Tetraeder- oder Oktaederplätzen ist in dieser Richtung mit qualitativen Argumenten kaum möglich. Vergleicht man die Flächen, die von den Kurvenmaxima und der Verbindungslinie Wendepunkt - Wendepunkt (vgl. Abschnitt 5.3) eingeschlossen werden, so ergibt sich die Proportion 1.1 ± 0.3 (experimentell) : 1 (Tetraeder) : 3.5 (Oktaeder). Das spricht eindeutig für Tetraederplätze. Es ist möglich, durch eine Multiplikation und Faltung der theoretischen Kurven auch eine annähernde Übereinstimmung zwischen dem Profil für Oktaederplätze und der gemessenen Kurve zu erzwingen. Jeoch beträgt die zu wählende Standardabweichung der Gausskurve dann ca. 1.2° , ein Wert der wesentlich über der effektiven Strahldivergenz des Experiments liegt.

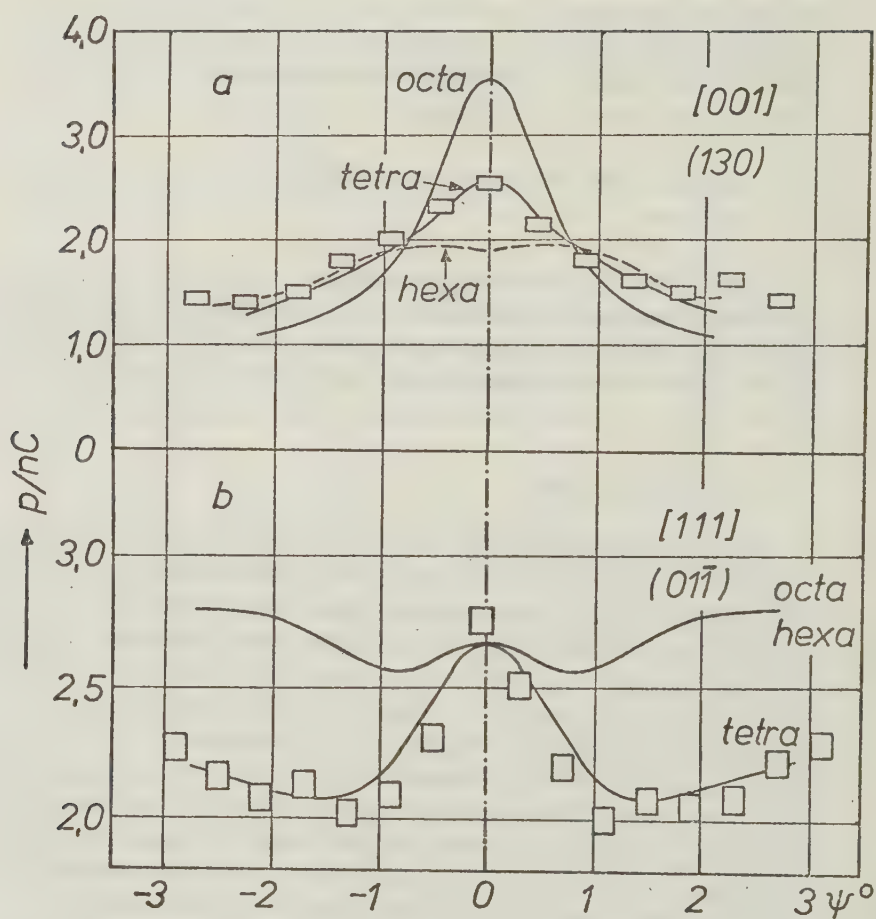


Abb. 28 Vergleich der experimentellen Protonenausbeute-profile (Rechtecke) mit berechneten Profilen

6.2.2 $\langle 111 \rangle$ Richtung

In dieser Richtung sind die theoretischen Kurven für Oktaeder- und Hexaederplätze identisch. Beide kann man allein schon wegen der vom gemessenen Profil grundlegend verschiedenen Kurvenform ausschliessen. Dagegen stimmt die gemessene Kurve (auch quantitativ) gut mit dem für Tetraederplätze berechneten Profil überein. Man vergleiche insbesondere die Übereinstimmung auch bei grösseren Winkeln ($\psi > 1.5^\circ$).

7. Diskussion

7.1 Deuterium und Wasserstoff in Niob

Die Ergebnisse des letzten Abschnittes zeigen eindeutig, dass Deuterium in Niob bei einer Konzentration von 2 Atomprozent und einer Temperatur von 150 K Tetraederplätze mit den Koordinaten $(1/2, 1/4, 0)$ besetzt.

Bei einer gleichzeitigen Besetzung von Tetraederplätzen und einem oder zwei weiteren Positionstypen hat man bei der Berechnung der Gesamtausbeute die Ausbeuteprofile der einzelnen Positionsarten zu wichten und zu addieren. In $\langle 111 \rangle$ liefert das in jedem Fall eine Abflachung des Maximums, wobei aber die Halbwertsbreite annähernd erhalten bleiben muss. Das gleiche gilt in $\langle 001 \rangle$ für eine gleichzeitige Besetzung von Hexaeder- und Tetraederplätzen, während eine gleichzeitige Besetzung von Oktaeder- und Tetraederplätzen eine Erhöhung des Maximums bringt. Aus der Abweichung der theoretischen von den experimentell ermittelten Profilen und aus den Fehlergrenzen der Einzelmessungen kann jedoch geschlossen werden, dass der Prozentsatz an Deuterium, das in einer gemischten Besetzung Oktaeder- oder Hexaederplätze belegt, einen Betrag von 7 % nicht übersteigt (vgl. dazu Abb. 29). Über das Phasendiagramm von NbD_x bei $x \sim 0.02$ und $T \lesssim 0^\circ\text{C}$ liegen z.Z. noch keine Messungen vor. Für NbH_x ist in diesem Bereich die Phasengrenze (Gleichgewichtskonzentration C_{Ph} zwischen α - und $\alpha + \beta$ -Phase) durch die Beziehung: $C_{\text{Ph}} = 57 \cdot \exp(-0.093 \text{ eV/kT})$ gegeben (/26/, C_{Ph} in Atom %). Bei 150 K : $C_{\text{Ph}} = 0.043$ Atom %. Bei einem Deuteriumgehalt der Probe von 2 Atom % liegt demnach nur ein Bruchteil von 0.02 der Deuteriumatome als α -Phase vor, der aber ca. 98 % des Probenvolumens einnimmt. Der Rest des Probenvolumens (ca. 2 %) wird von der β -Phase eingenommen, die aber 98 % des gelösten Deuterium enthält. Demnach wurden bei 150 K die Deuteriumpositionen der β -Phase bestimmt (über den Einfluss der β -Phase auf die Gitterführung vgl. Abschnitt 4.4.5).

Das Ergebnis dieser Messungen - Besetzung von Tetraederplätzen in der β -Phase von NbD_x - ist in Übereinstimmung mit dem Ergebnis, das Somenkov /48/ aus Neutronenstreuexperimenten bei hoher Konzentration erhielt. Somenkov untersuchte polykristallines $\text{Nb H}_{0.84}$, $\text{NbH}_{0.95}$ und $\text{Nb D}_{0.86}$, $\text{NbD}_{0.95}$ bei Temperaturen von Zimmertemperatur bis etwa 160°C (β -Phase) und fand, dass nur eine Besetzung von Tetraederplätzen mit den Messungen verträglich ist.

Ausser den oben besprochenen Experimenten bei 150 K wurden Messungen bei 295 K durchgeführt. Die Niobproben besaßen annähernd denselben Deuteriumgehalt wie bei den Tieftemperaturexperimenten (1.5 bis 3 Atomprozent). NbD_x liegt bei dieser Konzentration und Temperatur mit Sicherheit als reine α -Phase vor (vgl. das Phasendiagramm von H in Nb, Abb. 4). Die in $\langle 111 \rangle$ gemessenen Ausbeuteprofile (Abb. 30) weisen eine grössere Halbwertsbreite (295 K : volle Halbwertsbreite $\Delta\psi = 1.75^\circ$; zum Vergleich 150 K : $\Delta\psi = 0.9^\circ$) und ein kleineres Maximum von 28.5 % (zum Vergleich 150 K : 36.5 %) auf als bei 150 K, besitzen aber die gleiche Form. Jedoch wurden keine Modellrechnungen von Deuteronenfluss- und -energieverteilung durchgeführt. Eine höhere Kristalltemperatur bewirkt eine Abnahme des Flusses in der Kanalmitte (sowohl bei axialem als auch bei planarem Channeling, vgl. z.B. /19/). Der Grund hierfür sind die grösseren Amplituden der Gitterschwingungen (150 K : $0.058 \text{ \AA}$, 295 K : $0.0765 \text{ \AA}$), die verstärkt zur Vergrösserung der Querenergie beitragen. Bei der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Deuteriumatome um die Zwischengitterpositionen äussert sich die Temperaturerhöhung in einer Zunahme der Breite $2\bar{x}$ der Verteilung (150 K : $\bar{x} = 0.178 \text{ \AA}$, 295 K : $\bar{x} = 0.191 \text{ \AA}$, s. Tab.2). Somit führt eine Temperaturerhöhung zu einer Abflachung und Verbreiterung der Protonenausbeuteprofile. Sie lässt aber die Form der Profile im wesentlichen unverändert, zumindest solange man noch von einer Besetzung eines Zwischengitterplatzes sprechen kann. In $\langle 111 \rangle$ erhält man demnach bei Oktaeder- und

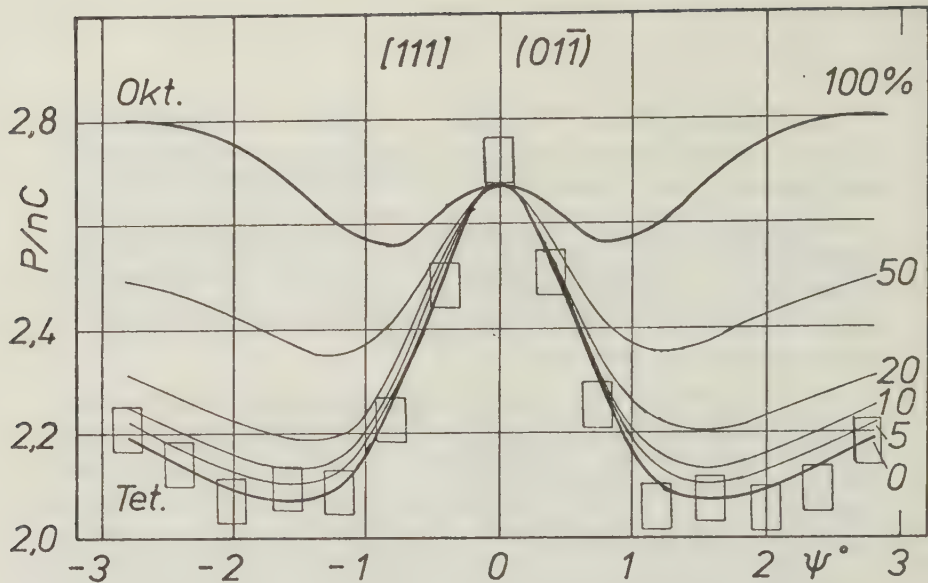


Abb. 29 Berechnete Protonenausbeute für eine gemischte Besetzung von Tetraeder- und Oktaederpositionen. Parameter: Anteil der Oktaederlage. Rechtecke: Messwerte

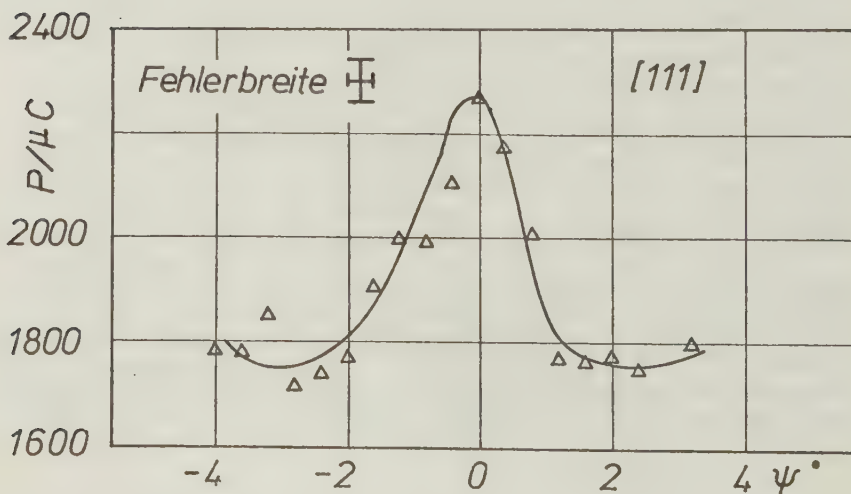


Abb. 30 Abhängigkeit der Protonenausbeute vom Einschusswinkel ψ gegenüber $\langle 111 \rangle$, $T = 295 \text{ K}$

Hexaederplätzen eine Ausschmierung des Minimums und bei Tetraederplätzen eine Abflachung des Maximums. Die experimentelle Kurve in $\langle 111 \rangle$ (Abb. 30) zeigt genau diesen Trend. Das Ausbeutemaximum spricht eindeutig für die Besetzung von Tetraederplätzen. Die Deuteriumatome sitzen demnach bei einer Konzentration von ca. 2 Atom % auch bei 295 K (reine α -Phase) auf Tetraederplätzen. Dieses Ergebnis ist in Übereinstimmung mit Messungen aus jüngerer Zeit von Stump u.a. /2/ am System NbH_x . Die Autoren fanden aus Neutronenstreuexperimenten an einkristallinem $\text{NbH}_{0.07}$ bei 235°C und 256°C (reine α -Phase), dass Wasserstoff in der α -Phase Tetraederplätze besetzt.

7.2 Zur Channeling-Methode

Die Channeling-Methode zur Bestimmung von Zwischengitterpositionen ist nicht auf die D-D-Reaktion beschränkt. Jede dem Ionenfluss proportionale Reaktion zwischen einem Ionenstrahl und Zwischengitteratomen ist geeignet, wie Kernreaktionen, Röntgenanregung (vgl. /4/) oder auch einfach Rückstreuung (vgl. /17/). Jedoch müssen bei höheren Ionenenergien, wie sie z.B. manche Kernreaktionen erfordern, besondere Anforderungen an die Strahldivergenz gestellt werden ($\Delta\psi \ll \psi_1 = (2 Z_1 Z_2 e^2 / dE)^{1/2}$), um einen geführten Strahl (Channeling) zu erhalten. Ein Nachteil der Channeling-Methode ist ihre Empfindlichkeit gegenüber Kristallfehlern, insbesondere deshalb, weil durch die Methode selbst Strahlungsschäden erzeugt werden. Jedoch überzeugt sie durch ihren (im Vergleich zu Neutronenstreuexperimenten) geringen experimentellen Aufwand und die eindeutige Interpretierbarkeit der Messungen.

8 Zusammenfassung

Mit der Channeling-Methode wurden die Zwischengitterpositionen von Deuterium in Niob bestimmt. Hierbei nutzt man die führende Wirkung der regelmässigen Atomanordnung eines Kristallgitters auf die Bewegung schneller Ionen im Kristall. Es ergibt sich an den Potentialminima zwischen den Atomreihen eine erhöhte Ionenflussdichte, deren Höhe empfindlich vom Einschusswinkel der Ionen zur Gitterrichtung abhängt. Sie ist am grössten bei parallelem Einschuss. Misst man die Ausbeute einer Reaktion zwischen den einfallenden Ionen und den betrachteten Zwischengitteratomen in Abhängigkeit vom Einschusswinkel der Ionen, so erhält man daraus Aufschluss über die Änderung des Ionenflusses an den Zwischengitterpositionen. Kennt man umgekehrt die Winkelabhängigkeit der Flussverteilung, so kann man aus den gemessenen Ausbeuteprofilen Rückschlüsse auf die Lage der Zwischengitteratome ziehen.

Als Nachweis dienten die 3 MeV Protonen der $D(d,p)T$ Reaktion zwischen eingeschossenen Deuteronen und im Niobeinkristall gelösten Deuteriumatomen (Konzentration: 1.5 - 3 Atom %, Mess-temperatur: 295 K (α -Phase), 150 K (überwiegend β -Phase)). Gemessen wurde die Protonenausbeute in Abhängigkeit vom Einfallswinkel gegenüber einer $[001]$ bzw. $[11\bar{1}]$ Achse des Niobkristalls in den Ebenen (130) bzw. $(01\bar{1})$. Die Protonenprofile weisen in beiden Richtungen Maxima von ca. 65 % in $\langle 001 \rangle$ bzw. ca. 40 % in $\langle 111 \rangle$ auf.

Zur Diskussion stehen drei Positionsarten: Tetraederplätze $(1/4, 1/2, 0)$, Oktaederplätze $\{(1/2, 0, 0) \text{ und } (1/2, 1/2, 0)\}$ und Hexaederplätze $(1/4, 1/4, 1/4)$. Die Protonenausbeute für diese verschiedenen Positionsarten wurde aus Modellrechnungen der Fluss- und Energieverteilung der eingeschossenen Deuteronen und den Verteilungen der gelösten Deuteriumatome im Kristall ermittelt. Die Berechnung der Fluss- und Energieverteilung für eine Kristalltemperatur von 150 K enthielt: Einzelstreuung an den Kristallatomen (Molièresche Näherung zum Thomas-Fermi-Po-

tential), unkorrelierte thermische Gitterschwingungen (Berechnung der Amplituden nach dem Debyemodell), ortsabhängigen elektronischen Energieverlust und Kleinwinkelstreuung an den Kristallelektronen in Abhängigkeit von der Elektronendichte. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der gelösten Deuteriumatome um ihre Ruhelage wurde aus Diffusionsdaten erhalten.

Die bei 150 K gemessenen Profile (ca. 98 % der gelösten Deuteriumatome liegen als β -Phase vor) stimmen sowohl in $\langle 001 \rangle$ als auch in $\langle 111 \rangle$ nur mit den für Tetraederplätze berechneten Profilen überein. Die Messungen bei 295 K (reine α -Phase) ergaben ähnliche Profile wie bei 150 K. Daraus wird gefolgert, dass Deuterium in $\text{NbD}_{0.02}$ sowohl in der α -Phase, als auch in der β -Phase Tetraederplätze besetzt.

An erster Stelle möchte ich Herrn Prof. Dr. R. Sizmann danken, der mich nicht nur mit dieser Arbeit betraut, sondern auch stets bereitwillig die Probleme dieser Arbeit mit mir diskutiert und mich durch zahlreiche Hinweise unterstützt hat.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. W. Brandt, New York University, der es mir ermöglichte, an seinem Institut den experimentellen Teil der Arbeit durchzuführen. Weiter möchte ich Herrn Dr. R. Laubert, NYU, danken, der mich bei allen experimentellen Problemen beraten hat, sowie Herrn Dipl.-Phys. G. Dürr, NYU, für seine Mithilfe bei der Durchführung der Experimente. Ebenso bin ich Herrn Dr. S. Roth zu Dank verpflichtet für seine Hinweise den theoretischen Teil der Arbeit betreffend, sowie bei der Erstellung des Computerprogrammes.

Auch all denen, die noch zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben, sei an dieser Stelle gedankt, insbesondere Fräulein D. Hegenberg und Herrn H. Bradatsch.

Symbolliste

a	=	Gitterkonstante von Niob
a_B	=	Bohrscher Radius des Wasserstoffatoms
a_{TF}	=	Thomas-Fermi-Radius
C	=	Deuteriumkonzentration
E	=	kinetische Energie der Deuteronen
$\bar{E}(\vec{r})$	=	mittlere kin. Deuteronenenergie an der Stelle $\vec{r}$
E_A	=	Aktivierungsenergie für Diffusion
E_r	=	kinetische Energie der Relativbewegung
$f(\vec{r})$	=	Ortverteilung der gelösten Deuteriumatome
$g(\vec{r})$	=	Wahrscheinlichkeitsverteilung eines Deuteriumatoms um seine Gitterposition
$K_0(x)$	=	modifizierte Besselfunktion 0-ter Ordnung
$K_1(x)$	=	modifizierte Besselfunktion 1-ter Ordnung
M_1	=	Masse eines Deuterons
M_2	=	Masse eines Niobatoms
N	=	Zahl der Niobatome pro cm^3
$\vec{r}$	=	Ortsvektor
s	=	Stossparameter
T	=	Temperatur
T_D	=	Debyetemperatur
$W(\vec{r}, E)$	=	Verteilungsfunktion der Deuteronen im Niobkristall
Y	=	Protonenausbeute
Z_1	=	Ordnungszahl von Deuterium
Z_2	=	Ordnungszahl von Niob
ϵ	=	Energieverlust

ϑ = Streuwinkel im Laborsystem

$\Phi(r/a)$ = Thomas Fermi - Funktion

$\Phi(X)$ = Debyefunktion

ψ = Einschusswinkel der Deuteronen

Ω = Raumwinkel des Detektors

Literaturverzeichnis

- /1/ D.N. Beshers: An Investigation of Interstitial Sites in the bcc Lattice, UCRL-7184 (1963)
- /2/ N. Stump, W. Gissler, and R. Rubin, in: Hydrogen in Metals, Jülich Conference 6 (vol. 1), März 1972, S. 375
- /3/ F.H. Eisen, in: Proc. II Int. Conf. Ion-Implantation in Semiconductors, May 24-28 (1971), S. 287, Garmisch-Partenkirchen, Germany
- /4/ J.A. Cairns, R.S. Nelson, and J.S. Briggs, in Ref. /3/, S. 299
- /5/ K. Tachibana, K. Morita, and N. Itoh, Solid State Communications 9, 1425 (1971)
- /6/ N. Iue, N. Matsunami, K. Morita, M. Yoshida, and S. Hirota, Radiation Effects 14, 191 (1972)
- /7/ G.A. Iferov, G.P. Pokhil, and A.F. Tulinov, Soviet Physics JETP Letters, 5. Jan. - June 1967, S. 201
- /8/ H. Fischer, R. Sizmann, and F. Bell, Z.Physik 224, 135 (1969)
- /9/ F. Fairbrother: The Chemistry of Niobium and Tantalum, Elsevier Publ. Comp. Amsterdam/London/New York 1967
- /10/ M.J. Trzeciak, D.F. Diltney, and M.W. Mallett: Study of Hydrides, USAEC Report BMI-1112, Battelle Memorial Institute, July 12, 1956
- /11/ G. Brauer and H. Mueller, Angew.Chemie 70, 53 (1958)
- /12/ G. Brauer and H. Mueller, J.Inorg.Nucl.Chem.17, 102 (1961)
- /13/ A. Sieverts and H. Moritz, Z.Anorg.Allg.Chemie 247,124 (1941)
- /14/ W.M. Albrecht, W.D.Goode, and M.W. Mallett, J. Electrochem. Soc. 106, 981 (1959)
- /15/ D.V. Morgan and D. Van Vliet: A Computer Code to Study the Trajectories of Fast Ions in Crystals, Harwell-Report AERE-R 6283 (1970)
- /16/ S. Komjathy, J. Less-Common Metals 2, 466 (1960)

- /17/ J.U. Andersen, O. Andreassen, J.A. Davies, E. Uggerhøj, Radiation Effects 7, 25 (1971)
- /18/ R.J. Walter and W.T. Chandler, Trans.Met.Soc. AIME, Vol. 233, 762 (1965)
- /19/ D. van Vliet, Radiation Effects 10, 137 (1971)
- /20/ C. Wainwright, A.J. Cook, and B.E. Hopkins, J. Less-Common Metals 6, 362 (1964)
- /21/ R.R. Arons, H.G. Bohn, and H. Lütgemeier, Ref./2/, S. 272
- /22/ G. Schaumann, J. Völkl, and G. Alefeld, Phys.Rev.Letters 21, 891 (1968)
- /23/ G. Alefeld, pers. Mitteilung
- /24/ W. Mueller, J.P. Blackledge, and G.G. Libowitz: Metal Hydrides, Academic Press 1968, S. 608
- /25/ W. Gissler and H. Rother, Physica 50, 380 (1970)
- /26/ G. Schaumann, J. Völkl, and G. Alefeld, Phys. Stat. Sol. 42, 401 (1970)
- /27/ D. Zamir and R.M. Cotts, Phys.Rev. 134 A, 666 (1964)
- /28/ R.S. Nelson, Phil. Mag. 15, 845 (1967)
- /29/ J.B. Marion and J.L. Fowler: Fast Neutron Physics, Interscience Publ., New York 1960
- /30/ W.A. Wenzel and W. Whaling, Phys.Rev. 88, 1149 (1952)
- /31/ J.H.L. Birchall and D.K. Ross, Ref. /2/, S. 313
- /32/ J. Lindhard, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk.34, Nr. 14 (1965)
- /33/ Chr.Lehmann and G. Leibfried, Z.Physik 172, 465 (1963)
- /34/ G. Molière, Z. Naturforsch. 2 A, 142 (1947)
- /35/ M. Abramowitz and I.A. Segun: Handbook of Mathematical Functions, Dover Publ., New York 1968
- /36/ R.J. Glauber, Phys. Rev. 98, 1692 (1955)
- /37/ V. Lottner, pers. Mitteilung

- /38/ J. Lindhard, M. Scharff and H.E. Schiøtt, Mat.Fys.Medd. Dan. Vid. Selsk. 33, Nr. 14 (1963)
- /39/ W.M. Gibson, C. Erginsoy, H.E. Wegner, and B.R. Appleton, Phys. Rev. Letters 15, 357 (1965)
- /40/ F.H. Eisen, Phys. Letters 23, 401 (1966)
- /41/ O.B. Firsov, Soviet Physics JETP 36, 1076 (1959)
- /42/ C. Varelas and J. Biersack, Nucl. Instr. Meth. 79, 213 (1970)
- /43/ C.F. Williamson, J.P. Boujot, and J. Picard: Tables of Range and Stopping Power of Chemical Elements for Charged Particles of Energy 0.05 to 500 MeV, Rapport CEA-R 3042, Paris 1966
- /44/ D. Van Vliet: On the Angular Dispersion of Channelled Ion Beams, Harwell-Report AERE-R 6395 (1970)
- /45/ L.D. Landau, E.M. Lifschitz: Lehrbuch der Theoretischen Physik I, Mechanik, S. 61, Akademie-Verlag, Berlin 1962
- /46/ J.H. Barret, Phys. Rev. 3 B, 1527 (1971)
- /47/ F. Abel, G. Amsel, M. Bruneaux, and C. Cohen, Phys. Letters 42 A, 165 (1972)
- /48/ V.A. Somenkov, A.V. Gurskaya, M.G. Zemlyanov, M.E. Kost, N.A. Chernoplekov, and A.A. Chertkov, Soviet Physics - Solid State 10, 1076 (1968)
- /49/ J.C. North and W.M. Gibson, Appl. Phys. Letters 16, 126 (1970)
- /50/ G. Barsch: Orts- und Zeitkorrelationen im Kristallgitter, Dissertation, Göttingen 1955
- /51/ W. Brandt and J. Reinheimer, Phys. Rev. 2 B, 3104 (1970)

Anhang: Komputerprogramm


```

00010 C
00020 C
00030 C BEKRECHNUNG DER FELD KOMPONENTEN W(X,Y,Z) UND DER ENERGIEVERTEILUNG
00040 C W(X,Y,Z) GLEICHZEITLICH DEUTERONEN IN NIJB
00050 C MIT THERMISCHEN SCHWINGUNGEN, TEMPERATUR = 150 GRAD KELVIN
00060 C MIT STREUUNG AN ELEKTRONIEN
00070 C MIT ELEKTRONISCHEN ENERGIEVERLUST
00080 C DEUTERIUM Z1 = 1
00090 C NIJB Z2 = 41, GITTERKONSTANTE = A
00100 C ENERGIEVERLUST DELE = EP*SIL
00110 C STREUWINKEL THETA = THE*TA/E
00120 C ANFANGSENERGIE E0 = 300 KEV
00130 C EINSCHUSSEBENE (1 0 0)
00140 C EINSCHUSSWINKEL = 0,0 GRAD
00150 C
00160 C A = 3,294
00170 C D = A/2,0
00180 C D2 = D/2,0
00190 C A2 = D
00200 C A15 = 1,5*A
00210 C A*YD = 0,529
00220 C Z1 = 1,0
00230 C Z2 = 41,0
00240 C RYD = 0,0135
00250 C FEP = 0,05
00260 C ΔEP = 0,3
00270 C δEP = 1,7
00280 C VMAX = 15
00290 C NX = 20
00300 C NY = 20
00310 C RXN = 20,0
00320 C RNY = 20,0
00330 C ATF = 0,8853*A*YD/Z2**((1,0/3,0))
00340 C ATF2 = 2,0*ATF
00350 C THE = Z1*Z2*RYD*2,0*A*YD/ATF
00360 C PI = 3,14159
00370 C PHIO = PI/9,0
00380 C PHIO2 = PHIO*PHIO
00390 C ELSCAT = 1,0/(4,0*1800,0)
00400 C DEFINE FILE 55(200,80,E,IPX)
00410 C DIMENSION PNDRM (2500)
00420 C DIMENSION THVIB (2500)
00430 C DIMENSION PXFELD(20,20), PYFELD(20,20)
00440 C DIMENSION XFELD(20,20), YFELD (20,20)
00450 C DIMENSION EFELD(20,20)
00460 C PSIGRO = 0,0
00470 C DIMENSION IA(400), SIL(400)
00480 C DIMENSION W(20,20,15), WE(20,20,15)
00490 C DIMENSION DECHAN(15), EDECH(15)
00500 C DIMENSION EEND(20,20)
00510 C READ (54) SIL,IA
00520 C READ(55) PNDRM
00530 C DO /I 1 = 1,2500
00540 C THVIB (I) = 0,058*PNDRM(I)
00550 C DATA W/6000*0,0/, WE /5000*0,0/
00560 C DATA DECHAN /15*0,0/, EDECH /15*0,0/
00570 C IPX=1
00580 C READ(56'IPX,72)PXFELD,PYFELD,XFELD,YFELD
00590 C IPX = 161
00600 C READ(56'IPX,73) EFELD
00610 C 72 FORMAT (10F8,5)
00620 C 73 FORMAT (10F8,4)
00630 C CALL TIME(ISEC)
00640 C WRITE (1,30) ISEC

```

```

000630      30      FORMAT(9H0SEKJNDEN,110)
000640      XRAND = 0.844222+
000650      DD 5 L = 1,XX
000660      DD 5 K = 1,YY
000670      X = XFELD(L,K)
000680      Y = YFELD(L,K)
000690      PXREL = PXFELD(L,K)
000700      PYREL = PYFELD(L,K)
000710      E = EFELD(L,K)
000720      IF(E.LT,50,0) GO TO 10
000730      EFELD(L,K) = 0,0
000740      DO 9 J=1,NMAX
000750      XRAND = RADD4F(XRAND)
000760      IGAUSS = IFIX (2000,0*XRAND) + 1
000770      DD 1 I = 1,5
000780      DX = X = THVIB (IGAUSS)
000790      IGAUSS = IGAUSS + 1
000800      DY = Y = THVIB (IGAUSS)
000810      IGAUSS = IGAUSS + 1
000820      S = SQRT(DX*DX + DY*DY)
000830      SREL = S/ATF
000840      EREL = E/100,0
000850      EP=FEP*EREL/(AEP*(EREL*EREL+1,0)+BEP*EREL)
000860      IF(SREL,LT,0,05) GO TO 5
000870      IF(SREL,GT,20,0) GO TO 11
000880      ISREL = IFIX(20,0*SREL)
000890      THETA = THE*TA(ISREL)/E
000900      DELE = EP*SIL(ISREL)
000910      GO TO 12
000920      11      THETA = 0,0
000930      DELE = EP
000940      12      CONTINUE
000950      STREU = SORT(ELSCAT*(DELE-EP)/E)
000960      PXREL = PXREL + THETA*DX/S + PNORM (IGAUSS)*STREU
000970      IGAUSS = IGAUSS + 1
000980      PYREL = PYREL + THETA*DY/S + PNORM (IGAUSS)*STREU
000990      IGAUSS = IGAUSS + 1
001000      X = X + D*PXREL
001010      Y = Y + D*PYREL
001020      E = E - DELE
001030      PHI2 = PXREL*PXREL + PYREL*PYREL
001040      IF(PHI2,GT,PHI02) GO TO 5
001050      XSUB = AMOD(X + A15,A)
001060      YSUB = AMOD(Y + A15,A)
001070      INTX = IFIX(RNX*XSUB/A) + 1
001080      INTY = IFIX(RNY*YSUB/A) + 1
001090      W(INTX,INTY,J) = W(INTX,INTY,J) + 1,0
001100      WE(INTX,INTY,J) = WE(INTX,INTY,J) + E
001110      26      CONTINUE
001120      X = AMOD(X = SIGN(A2,X),A)
001130      Y = AMOD(Y = SIGN(A2,Y),A)
001140      DX = X = THVIB (IGAUSS)
001150      IGAUSS = IGAUSS + 1
001160      DY = Y = THVIB (IGAUSS)
001170      IGAUSS = IGAUSS + 1
001180      S = SQRT(DX*DX + DY*DY)
001190      SREL = S/ATF
001200      EREL = E/100,0
001210      EP=FEP*EREL/(AEP*(EREL*EREL+1,0)+BEP*EREL)
001220      IF(SREL,LT,0,05) GO TO 5
001230      IF(SREL,GT,20,0) GO TO 13
001240      ISREL = IFIX(20,0*SREL)

```

```

001250      THETA = THE*TA(ISREL)/E
001260      DELE = EP*SIL(ISREL)
001270      GO TO 14
001280      13      THETA = 0.0
001290      DELE = EP
001300      14      CONTINUE
001310      STREU = SQRT(ELSCAT*(DELE=EP)/E)
001320      PXREL = PXREL + THETA*DX/S + PNDRM (IGAUSS)*STREU
001330      IGAUSS = IGAUSS + 1
001340      PYREL = PYREL + THETA*DY/S + PNDRM (IGAUSS)*STREU
001350      IGAUSS = IGAUSS + 1
001360      X = X + D*PXREL
001370      E = E - DELE
001380      Y = Y + D*PYREL
001390      PHI2 = PXREL*PXREL + PYREL*PYREL
001400      IF(PHI2.GT.PHI02) GO TO 5.
001410      X = AMOD(X-SIGN(A2,X),A)
001420      Y = AMOD(Y-SIGN(A2,Y),A)
001430      XSUB = AMOD(X + A15,A)
001440      YSUB = AMOD(Y + A15,A)
001450      INTX = IFIX(RNX*XSUB/A) + 1
001460      INTY = IFIX(RNY*YSUB/A) + 1
001470      W(INTX,INTY,J) = W(INTX,INTY,J) + 1.0
001480      WE(INTX,INTY,J) = WE(INTX,INTY,J) + E
001490      1      CONTINUE
001500      IF(E.LT.50.0) GOTO 10.
001510      9      CONTINUE
001520      PXFELD(L,K) = PXREL
001530      PYFELD(L,K) = PYREL
001540      XFELD(L,K) = X
001550      YFELD(L,K) = Y
001560      EFELD(L,K) = E
001570      GO TO 10
001580      5      DECHAN(J) = DECHAN(J) + 1.0
001590      EDECH(J) = EDECH(J) + E
001600      10     EEND(L,K) = E
001610      6      CONTINUE
001620      DO 4 J = 1,NMAX
001630      IF(DECHAN(J).GT.0.0) EDECH(J) = EDECH(J)/DECHAN(J)
001640      4      CONTINUE
001650      DO 2 J = 1,NMAX
001660      DO 2 IX = 1,NX
001670      DO 2 IY = 1,NY
001680      IF(W(IX,IY,J).GT.0.0) WE(IX,IY,J) = WE(IX,IY,J)/W(IX,IY,J)
001690      2      CONTINUE
001700      CALL TIME(ISEC)
001710      WRITE (1,30) ISEC
001720      IPX = 1
001730      WRITE (56,IPX,72) PXFELD,PYFELD,XFELD,YFELD
001740      IPX = 161
001750      WRITE (56,IPX,73) EFELD
001760      WRITE (1,75) PSIGRD
001770      76      FORMAT(1H1,9X,17HEINSCHUSSWINKEL =,F10.5,4HGRAD)
001780      WRITE(1,77)
001790      77      FORMAT(1H1,9X,11HP X F E L D//)
001800      WRITE (1,78) PXFELD
001810      78      FORMAT(1H0,9X,20F7,4)
001820      WRITE (1,79)
001830      79      FORMAT(1H1,9X,11HP Y F E L D//)
001840      WRITE (1,78) PYFELD
001850      WRITE (1,82)
001860      82      FORMAT(1H1,9X,9HX F E L D//)

```

```

001870      WRITE (1,78) XFELD
001880      WRITE (1,83)
001890      B3  FORMAT(1H1,9X,9HY F E L D//)
001900      WRITE (1,78) YFELD
001910      WRITE (1,84)
001920      B4  FORMAT(1H1,9X,9HE F E L D//)
001930      WRITE (1,85) EFELD
001940      B5  FORMAT(1H0,9X,2OF7,1)
001950      WRITE (1,300)
001960      300  FORMAT(10X,13HDECHANNELRATE/1H0,9X,2HJ=,18X,7HDECHAN=/1H0)
001970      WRITE (1,310) (J,DECHAN(J),J=1,NMAX)
001980      310  FORMAT(X,119,F20,0)
001990      WRITE (1,400)
002000      400  FORMAT(1H0,9X,16HDECHANNLENERGIE/1H0,9X,2HJ=,18X,6HEDECH=/1
002010      WRITE (1,410) (J,EDECH(J),J=1,NMAX)
002020      410  FORMAT(X,119,F20,3)
002030      WRITE (1,500)
002040      500  FORMAT(1H0,9X,14HTEILCHENDICHTHE)
002050      DO 501 J = 1,NMAX
002060      WRITE (1,510) J
002070      510  FORMAT(1H1,9X,2HJ=,15//)
002080      WRITE (1,520) ((W(IX,IY,J),IX=1,NX),IY=1,NY)
002090      520  FORMAT(1H0,9X,2OF6,0)
002100      501  CONTINUE
002110      WRITE (1,600)
002120      600  FORMAT(1H0,9X,17HENERGIEVERTEILUNG)
002130      DO 601 J = 1,NMAX
002140      WRITE (1,610) J
002150      610  FORMAT(1H1,9X,2HJ=,15//)
002160      WRITE (1,620) ((WE(IX,IY,J),IX=1,NX),IY=1,NY)
002170      620  FORMAT(1H0,9X,2OF7,1)
002180      601  CONTINUE
002190      WRITE (1,700)
002200      700  FORMAT(1H1,9X,10HENDENERGIE//)
002210      WRITE (1,710) ((EEND(IX,IY),IX=1,NX),IY=1,NY)
002220      710  FORMAT(1H0,9X,2OF7,1)
002230      74  FORMAT (20OF5,J)
002240      75  FORMAT (20OF5,1)
002250      80  FORMAT (1H0,9X,74XRAND =,F10,7)
002260      CALL TIME(ISEC)
002270      WRITE (1,30) ISEC
002280      STOP
002290      END
ENDE PROTOKOLL

```

ERZEUGTES MD 1 STDHP
 UEBERSETZUNG FEHLERFREI

ENDE PS&FNCOMP (1,11) 2,63
 # MONTIERE

START PS&MONTSEG4 (12,11)
 MONTAGE ERFORDERT MEHR PLATTENSPEICHER

ABBRUCH DER MONTAGE

KONNEKTORSTAND 5

FEHLER: OPERATORLAUF MIT FEHLER BEENDET

STARTE, DUMP=F, NICHTS, DATEI=54-SILTA'55-NORMAL'56-IMPULS,
 DNUMMER=106'1205

Lebenslauf

Geboren am 8. Juni 1942 in München. Besuch der Knabenvolkschule Perlach in München vom 6. - 10. Lebensjahr. Nach bestandener Aufnahmeprüfung (1952) Besuch des Wilhelmsgymnasiums (humanistisch) in München. 1961 Ablegung der Reifeprüfung. Im selben Jahr Beginn des Physikstudiums an der Universität München. Zu Beginn des 6. Semesters Ablegung der Vordiplomprüfung in Physik. Im 10. Semester Beginn einer Diplomarbeit aus dem Bereich der Festkörperphysik am Institut von Prof. R. Sizmann. 1969 Ablegung der Diplom-Hauptprüfung für Physik und Beginn einer Doktorarbeit am gleichen Institut. Von Juni 1969 - Juli 1970 an der New York University zur Durchführung von Experimenten. Nach Rückkehr nach München Fortsetzung der Doktorarbeit.

